

Werner Sick.

Diss. Frankfurt a/Main

1904





Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550813_0040

Ion-Atom Stöße bei Zweielektronensystemen
im zeitabhängigen Hartree-Fock Bild

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik der
Johann-Wolfgang-Goethe - Universität
zu Frankfurt am Main

von

Werner Stich
aus Kempten/Allgäu

Präsident: Prof. Dr. H. Schmees
Leiter der Arbeit: Prof. Dr. H. J. Beyer
Begutachter: Prof. Dr. H. J. Beyer
Frankfurt am Main
1984

Tag der mündlichen Prüfung: 12.7.1984

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik
der Johann-Wolfgang-Goethe - Universität
zu Frankfurt am Main

Dekan: Prof. Dr. F. Granzer
Leiter der Arbeit: Prof. Dr. R.M. Dreizler
Erstgutachter: Prof. Dr. R.M. Dreizler
Zweitgutachter: Prof. Dr. J.A. Maruhn

Tag der mündlichen Prüfung: 12.7.1984

Diese Arbeit wurde vom Juli 1983 bis Juni 1984 von der
FAZIT-Stiftung gefördert.

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung.....	1
1.1	Atomare Einheiten.....	5
2.	Die TDHF-Gleichungen in der SCA.....	7
2.1	Die semiklassische Naeherung.....	7
2.2	Die TDHF-Gleichungen.....	10
3.	Loesung der TDHF-Gleichungen.....	14
3.1	Die gekoppelten Kanalgleichungen.....	14
3.2	Das rotierende Koordinatensystem.....	18
3.3	Die Zweizentren-Basis.....	19
3.4	Der elektronische Hamiltonoperator.....	23
3.5	Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkung..	26
3.6	Anfangsbedingungen.....	28
3.7	Bemerkungen zur Numerik.....	29
4.	Die Berechnung von Uebergangswahrscheinlichkeiten.....	31
4.1	Projektion auf Endkanaele.....	32

4.2	Berechnung von pauschalen Uebergangswahrscheinlichkeiten.....	35
4.3	Die Berechnung von inklusiven Wahrscheinlichkeiten.....	38
4.4	Berechnung von Wirkungsquerschnitten.....	42
5.	Ergebnisse fuer Stoesse von nackten Ionen auf ein Heliumatom im Grundzustand.....	44
5.1	Das inertial bewegte Heliumatom.....	45
5.2	Das System $\text{He}^{++} + \text{He}(1s)$	47
5.2.1	Die zeitliche Entwicklung der Elektronendichte...	48
5.2.2	Die zeitliche Entwicklung von "Einfangswahrscheinlichkeiten".....	50
5.2.3	P(b) Kurven.....	54
5.2.4	Wirkungsquerschnitte.....	59
5.3	Das System $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2)$	62
5.4	Das System $\text{Li}^{3+} + \text{He}(1s^2)$	65
6.	Ergebnisse fuer Rechnungen mit beliebiger Anfangsverteilung der Elektronen.....	67
7.	Zusammenfassung und Ausblick.....	81
	Anhang.....	83

Referenzen.....	96
-----------------	----

1 Einleitung

In den letzten Jahren ist die Bedeutung von Ion-Atomstößen in der atomaren Streutheorie ständig gewachsen. Das gesteigerte Interesse an Stoßprozessen zwischen mehrfach geladenen Ionen und neutralen Atomen ist sowohl auf fundamentale Fragestellungen, als auch auf konkrete praktische Probleme und Anwendungen zurückzuführen [JAN81 und darin enthaltene Referenzen].

Die Streuung eines mehrfach geladenen Ions an einem Atom oder Molekül ist ein komplexes quantenmechanisches Problem, in dem Wechselwirkungen zwischen vielen Reaktionskanälen auftreten. Das Verständnis der Dynamik eines solchen Stoßprozesses würde ganz allgemein das Wissen um dabei auftretende Wechselwirkungen erweitern.

Neben solch fundamentalen Fragestellungen gibt es eine Reihe von ganz praktischen Problemen, die z.B. in der Hochtemperatur- und Nichtgleichgewichts-Plasmaphysik auftreten. Solche Plasmen existieren z.B. in astrophysikalischen Objekten, wie Sternen oder interstellarer Materie, oder werden in Forschungslaboratorien für verschiedenste Zwecke erzeugt. Auch in kleinsten Mengen stören mehrfach geladene Ionen die Eigenschaften der Plasmen, z.B. Ladungsverteilungen, Energiebilanz, Strahlung, wegen ihrer sehr großen Wirkungsquerschnitte für Elektroneneinfang.

Von besonderem Interesse ist das Wissen um solche Wirkungsquerschnitte vor allem für die kontrollierte Kernfusion. In den dabei benötigten Wasserstoff- bzw. Wasserstoffisotopen- Plasmen sind hochgestripte Ionen starke Verunreinigungen, die das ohmsche Aufheizen behindern und zu lokalen Instabilitäten führen, und damit das kontinuierliche Funktionieren eines Tokamak-Reaktors in Frage stellen können.

Ein weiterer Aspekt bei der Anwendung in der Kernfusion tritt auf beim zusätzlichen Aufheizen, oder Auffüllen, des Plasmas durch den Einschub eines neutralen Strahls. Insbesondere Ladungswechselreaktionen zwischen den neutralen Atomen und den mehrfach

geladenen Ionen an der Plasmaperipherie führen zu einem 'trapping' Effekt.

Dadurch wird nicht nur das Aufheizen, bzw. das Auffüllen, des Plasmas gestört, sondern die dabei entstehenden Ionen führen zu weiteren Plasmaverunreinigungen.

Eine weitere Anwendung der Ion-Atom-Stöße ist für die Plasma-diagnostik von Bedeutung. Durch Ladungswechselreaktionen eines definierten Strahls neutraler Atome im Plasma kann man Informationen über den Plasmazustand gewinnen.

Möglich wurden die Untersuchungen von Stoßprozessen zwischen mehrfach geladenen Ionen und Atomen durch:

- a) die Entwicklung von Ionenquellen in Verbindung mit verbesserten Beschleunigern, die es ermöglichen nahezu alle Elemente in jedem beliebigen Ladungszustand zu erzeugen.
- b) die verfeinerte experimentelle Technik, wie z.B. das Experimentieren mit gekreuzten Strahlen, sowie eine verbesserte Möglichkeit die Reaktionspartner nachzuweisen.
- c) nicht zuletzt die Entwicklung von immer größeren und leistungsfähigeren Computern, die es nicht nur dem Theoretiker erlauben komplexe Rechnungen durchzuführen, sondern auch für die Experimentatoren ein unverzichtbares Hilfsmittel für die Auswertung der Meßergebnisse darstellen.

Ausgangspunkt für die theoretische Beschreibung von nichtrelativistischen Atom-Atom bzw. Ion-Atom Stößen ist die Zweizentren Schrödingergleichung:

$$i\hbar \partial_t \Psi(\underline{x}, \underline{R}, t) = H \Psi(\underline{x}, \underline{R}, t) \quad (1.1)$$

$$H = T_N + V_{NN} + H_{el}$$

$$T_N = -\hbar^2/2\mu \Delta_R, \quad V_N = Q_1 Q_2 e^2/R$$

$$H_{el} = -\hbar^2/2m \sum_{j=1}^N \Delta_{\underline{r}_j} - \sum_{j=1}^N (Q_1 e^2/|\underline{r}_j - \underline{R}_1| + Q_2 e^2/|\underline{r}_j - \underline{R}_2|) \\ + 1/2 \sum_{i,j=1}^N e^2/|\underline{r}_i - \underline{r}_j|$$

wobei $\underline{x} = (\underline{r}_1 \dots \underline{r}_N, s_1 \dots s_N)$ die elektronischen Orts- und Spin-Koordinaten beschreibt. R steht für den internuklearen Abstand, R_1 bzw. R_2 sind die Koordinaten der Nukleonen bezogen auf den Nukleonenschwerpunkt. Bei der Formulierung der Schrödingergleichung im Schwerpunktsystem der Nukleonen und der Betrachtung der $\underline{r}_j$ als elektronische Relativkoordinaten macht man bereits die Näherung, daß die Elektronenmasse gegenüber der Nukleonenmasse vernachlässigt werden kann.

Für $R \rightarrow \infty$ ergeben sich als Randbedingung zwei Einzentren Schrödingergleichungen für die separierten Atome. Dadurch sind chemische Reaktionen, wie die Bildung stabiler Zweizentrenmoleküle ausgeschlossen.

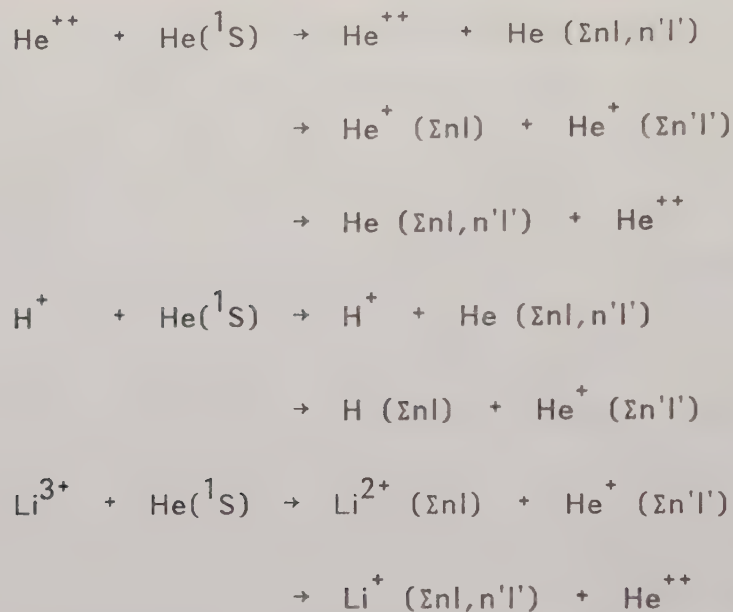
Je nach Einschußenergie haben sich verschiedene Ansätze zur Lösung der Schrödingergleichung bewährt. Für die Betrachtung von sehr schnellen Stößen behandelt man das Problem in Born'scher Näherung. Hierbei wird die Gesamtwellenfunktion nach Eigenfunktionen des asymptotischen Hamiltonoperators H_{el} entwickelt und der Einfluß des Projektils als Störung behandelt.

Im niederenergetischen Bereich löst man die stationäre Zweizentren Schrödingergleichung im Rahmen einer Partialwellenzerlegung (pss). Zwischen dem Gültigkeitsbereich der pss, typischerweise unter 100 eV, bis zum Gültigkeitsbereich der Born'schen Näherung hat sich die semiklassische Näherung (SCA) bewährt. In dieser Näherung behandelt man die Bewegung der Atomkerne klassisch und löst für

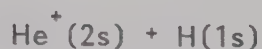


die Elektronen eine modifizierte, zeitabhängige Schrödingergleichung.

In dieser Arbeit wird die Behandlung von Ion-Atom Stößen für Zweielektronensysteme im Rahmen der SCA diskutiert. Die Mehrelektronenaspekte werden durch die zeitabhängige Hartree-Fock (TDHF) Theorie beschrieben. Neben der Berechnung von Wirkungsquerschnitten für die Reaktionen:



bei denen als Target jeweils ein Heliumatom im Grundzustand betrachtet wurde, wird die Auswirkung der Berücksichtigung des vollen Austauschterms für Spinsingulett- und Triplett- Zustände untersucht. Als Testsysteme hierfür wurden die Stoßsysteme



für beide Spinzustände gerechnet.

1.1 Atomare Einheiten

In der Atomphysik benutzt man üblicherweise als Skala die Eigenschaften des Wasserstoffatoms im Grundzustand. Man definiert die drei Größen:

$$\text{Länge} \quad 1 a_0 = .52917 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad \text{Bohr'scher Radius}$$

$$\text{Masse} \quad 1 m_e = 9.108 \cdot 10^{-28} \text{ g} \quad \text{Elektronenmasse}$$

$$\text{Zeit} \quad 1 s = 2.419 \cdot 10^{-17} \text{ sec} \quad \text{Umlaufzeit eines Elektrons auf der Bohrschen Bahn.}$$

Aus diesen Größen kann man alle weiteren ableiten, z.B. die Elementarladung

$$\begin{aligned} e &= 1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ C} \\ &= 1.6021 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^9 \frac{\text{cm}^{3/2} \text{ g}^{1/2}}{\text{sec}} \\ &= 1. \text{ a.u.} \end{aligned}$$

Für das Planck'sche Wirkungsquant erhält man:

$$\hbar = a_0 \cdot m_e \cdot e^2 = 1$$

Die Energie ist gegeben durch :

$$1 \text{ Hartree} = e^2/a_0 = 27.2107 \text{ eV,}$$

das entspricht der doppelten Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms.

Für die weitere Diskussion ist es nützlich, den Unterschied zwischen Elektronen- und Nukleonen-Massen zu beachten:

$$M_p \approx M_n = 1836.05 m_e ,$$

damit ergibt sich der "Kleinheitsparameter"

$$\frac{m_e}{M} = \frac{1}{1836.05} = .54 \cdot 10^{-3}$$

als eine Begründung für die Entkopplung von Nukleonenbewegung und Elektronenbewegung (siehe Kapitel 2), sowie für die Wahl eines Schwerpunktsystems mit dem Ursprung im Nukleonenschwerpunkt.

Eine Vorstellung von den auftretenden Größenordnungen erhält man durch folgende Betrachtung:

Bei einem $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$ -Stoß mit einer Einschußenergie von 5 keV/Nukleon dauert der gesamte Stoßvorgang ungefähr 50 s, d.h. etwa $1 \cdot 10^{-16}$ sec. In dieser Zeit legt das Projektil 20 a₀ zurück.

Das entspricht einer Länge von 10^{-7} cm, die mit einer Geschwindigkeit von 10^7 m/sec durchlaufen wird.

2 Die TDHF-Gleichungen in der SCA

2.1 Die semiklassische Naeherung

Für die theoretische Beschreibung von Atom-Atom bzw. Ion-Atom Stößen in einem Energiebereich von einigen keV/Nukleon bis hin zu mehreren hundert keV/Nukleon, hat sich die semiklassische Näherung (SCA) als geeignete Methode erwiesen [BR176,DEL72]. Im Folgenden will ich kurz aufzeigen, worin die einzelnen Näherungen in dieser Beschreibung liegen. Eine Ableitung der SCA findet man z.B. bei Bates und Holt [BAT67].

Für den Fall, daß der kleinste mittlere Abstand der Kerne groß ist im Vergleich zu ihrer de Broglie Wellenlänge, kann man die Wellengleichung der Nukleonen, im Sinne einer WKB-Näherung, durch eine Newton'sche Bewegungsgleichung approximieren:

$$\mu \frac{d^2 R(t)}{dt^2} = - \nabla U(R(t), t) \quad (2.1)$$

Als Konsequenz wird, über die Elektron-Kern Wechselwirkung, der elektronische Hamiltonoperator explizit zeitabhängig, d.h. die Zeitkomponente läßt sich nicht mehr trivial abseparieren. Für die Bewegung der Elektronen erhält man eine Vielelektronen Schrödingergleichung:

$$i \partial_t \Psi(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N, \underline{R}(t), t) = H_{el} \Psi(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N, \underline{R}(t), t) \quad (2.2)$$

Ersetzt man in Gleichung 2.1 das effektive interatomare Potential $U(\underline{R},t)$ durch ein stationäres Zentralpotential $U(R)$, so erhält man gerade eine Keplergleichung. Für die Nukleonen gilt dann Drehimpulserhaltung, d.h. man zeichnet dadurch eine Streuebene aus. Dies bewirkt eine zusätzliche Symmetrie der elektronischen Wellenfunktion (siehe Kapitel 3.3). Für große Stoßparameter, oder hohe Einschußenergien kann man das internukleare Potential ganz vernachlässigen, dann wird die Bahn der Nukleonen durch eine gerade Trajektorie beschrieben. Dieser Fall wird üblicherweise als Stoßparametermethode (IPA) bezeichnet. Als Lösung der Keplergleichung erhält man dann:

$$\underline{R}(t) = [v^2 t^2 + b^2]^{1/2} \underline{e}_z \quad (2.3)$$

wobei b der Stoßparameter und v die Relativgeschwindigkeit entlang der internuklearen Verbindungslinie ist.

Die Schrödingergleichung der SCA ist normerhaltend, solange der elektronische Hamiltonoperator hermitesch ist. Diese Eigenschaft wird durch die Vorgabe einer klassischen Bahn nicht verändert, wie man sofort durch Einsetzen der Schrödingergleichung in der SCA ($d_t = \partial_t + \dot{\underline{R}} \nabla_R$)

$$i d_t \Psi(\underline{x}_1 \dots \underline{x}_N, R(t), t) = (H_{el} + V_{NN}) \Psi(\underline{x}_1 \dots \underline{x}_N, R(t), t) \quad (2.4)$$

in

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \dot{\Psi} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \dot{\Psi} \rangle$$

(2.5)

sehen kann.

Aus der Struktur der Gleichung 2.2 folgt die Zeitumkehrinvarianz.

Ist $\Psi(\underline{x}, \underline{R}, t)$ Lösung der elektronischen Schrödingergleichung, so ist auch $\Psi^*(\underline{x}, \underline{R}, -t)$ eine Lösung.

Bestimmt man die Bahn der Nukleonen aus Gleichung 2.1, d.h. berücksichtigt man den Einfluß der Elektronenbewegung auf die Bewegung der Kerne, so ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig und es gilt Energieerhaltung. Durch die Vorgabe einer klassischen Bahn ist die Energie der Nukleonen erhalten, die für die Anregung der Elektronen benötigte Energie wird von außen zugeführt. Im Rahmen einer klassischen Bahn Näherung gilt die Energieerhaltung also nicht. Da die Anregungsenergie der Elektronen jedoch im eV Bereich liegt, die kinetische Energie der Kerne typischerweise im keV Bereich, kann man aber näherungsweise von Energieerhaltung sprechen.

2.2 Die TDHF Gleichungen

Die Vielelektronen-Schrödingergleichung (2.2) ist praktisch unlösbar, man ist deshalb auf weitere Näherungen angewiesen. Einen möglichen Einstieg bietet die, zuerst von Dirac [DIR30] formulierte, zeitabhängige Hartree-Fock (TDHF) Theorie, die bisher fast ausschliesslich in kernphysikalischen Rechnungen angewandt wurde. In dieser Näherung nimmt man an, daß die Vielteilchen Wellenfunktion $\Psi(\underline{x}_1 \dots \underline{x}_N, t)$ aus einer Slaterdeterminante aus N Einteilchen Wellenfunktionen besteht.

$$\Psi(\underline{x}_1 \dots \underline{x}_N, t) = A \{ \psi_1(\underline{x}_1, t) \dots \psi_N(\underline{x}_N, t) \}$$

(2.6)

Die TDHF-Gleichungen erhält man aus einem Variationsprinzip [KER76]. Minimierung des Wirkungsintegrals

$$J = \int dt \langle \Psi | H_{el} - i d_t | \Psi \rangle$$

(2.7)

bezüglich der komplexen Einteilchen Wellenfunktionen $\psi_\lambda^*(\underline{x}_\lambda, t)$ führt zu einem System von N gekoppelten, nichtlinearen Differentialgleichungen, den TDHF Gleichungen. Es ist gerade diese Nichtlinearität, die in kernphysikalischen Rechnungen Schwierigkeiten bei der Interpretation der Ergebnisse bereitet [GR182]. Wie wir später sehen werden (Kap. 5) sind diese Probleme in der Atomphysik weniger schwerwiegend, man ist hier in der Lage Übergangswahrscheinlichkeiten aus der Lösung der TDHF-Gleichungen zu extrahieren.

Variation des Wirkungsintegrals 2.7 nach der vollen Vielelektronen Wellenfunktion $\Psi(\underline{x}_1 \dots \underline{x}_N, \underline{R}, t)$ würde gerade die Vielelektronen Schrödingergleichung liefern.

Für ein Zweielektronensystem haben die TDHF-Gleichungen, im Rahmen der SCA, die Form:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_j(\underline{x}, t) = h_0 \Psi_j(\underline{x}, t) + (D-A) \Psi_j(\underline{x}, t) \quad j = 1, 2 \quad (2.8)$$

mit dem Einteilchen-Hamiltonoperator h_0 :

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{r}} - \frac{Q_1}{|\underline{r} - \underline{R}_1|} - \frac{Q_2}{|\underline{r} - \underline{R}_2|}$$

Im Weiteren nehmen wir an, daß die Einteilchen Raum-Spin Wellenfunktionen in Raum und Spin Anteile faktorisieren:

$$\Psi_j(\underline{x}, t) = \phi_j(\underline{r}, t) \chi_{\sigma_j}(s) \quad (2.9)$$

(D-A) ist die Elektron-Elektron Wechselwirkung, bestehend aus dem direkten Term D und dem Austauschterm A.

Der direkte Term ist spinunabhängig:

$$D \Psi_j(\underline{x}, t) = \sum_{k=1}^2 \int d^3r' \phi_k^*(\underline{r}', t) \phi_k(\underline{r}', t) / |\underline{r} - \underline{r}'| \Psi_j(\underline{x}, t) \quad (2.10)$$

Für den Austauschterm ist es wesentlich, welcher Spinzustand vorliegt:

$$\begin{aligned}
 A \Psi_j(\underline{x}, t) &= \sum_{k=1}^2 \sum_{\sigma} \int d^3 r' \phi_k^*(\underline{r}', t) \chi_{\sigma_k}^+(\underline{s}') \phi(\underline{r}', t) \chi_{\sigma_j}(\underline{s}') / |\underline{r} - \underline{r}'| \Psi_k(\underline{x}, t) \\
 &= \sum_{k=1}^2 \delta_{\sigma_j \sigma_k} \int d^3 r' \phi_k^*(\underline{r}', t) \phi_j(\underline{r}', t) / |\underline{r} - \underline{r}'| \Psi_k(\underline{x}, t)
 \end{aligned}
 \tag{2.11}$$

Damit erhält man für die gesamte Elektron-Elektron Wechselwirkung:

$$\begin{aligned}
 (D-A) \Psi_j(\underline{x}, t) &= \int d^3 r' \left[\sum_{k=1}^2 \phi_k^*(\underline{r}', t) \phi_k(\underline{r}', t) \Psi_j(\underline{x}, t) \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{k=1}^2 \delta_{\sigma_j \sigma_k} \phi_k^*(\underline{r}', t) \phi_j(\underline{r}', t) \Psi_k(\underline{x}, t) \right] / |\underline{r} - \underline{r}'| \\
 &= v_d \Psi_j(\underline{x}, t) - \sum_{k=1}^2 \delta_{\sigma_j \sigma_k} v^{kj} \Psi_k(\underline{x}, t)
 \end{aligned}$$

mit $v^{kj} = \int d^3 r' \phi_k^*(\underline{r}', t) \phi_j(\underline{r}', t) / |\underline{r} - \underline{r}'|$

und $v_d = \sum_{k=1}^2 v^{kk}$

(2.12)

Für den Fall identischer Ortswellenfunktionen $\phi_1 = \phi_2$ - die Spins müssen in diesem Fall wegen des Pauli-Prinzips antiparallel ausgerichtet sein - sieht man sofort:

$$(D-A) \Psi_j(\underline{x}, t) = 1/2 D \Psi_j(\underline{x}, t)$$

(2.13)

Im allgemeinen Falle erhält man die TDHF-Gleichungen für ein Zweielektronensystem:

$$i\partial_t \psi_1(\underline{x},t) = (h_0 + v^{22}) \psi_1(\underline{x},t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} v^{12} \psi_2(\underline{x},t)$$

$$i\partial_t \psi_2(\underline{x},t) = (h_0 + v^{11}) \psi_2(\underline{x},t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} v^{21} \psi_1(\underline{x},t)$$

(2.14)

Die TDHF-Gleichungen beschreiben die Zeitentwicklung für jedes Orbital durch eine Art Schrödingergleichung, bei der das Kopplungspotential durch den jeweiligen Zustand der Elektronen gegeben ist. Dieses sogenannte "mean-field" ist die einzige Kopplung zwischen den Orbitalen, d.h. alle echten Zweiteilcheneffekte, z.B. Korrelation, die dem Unterschied zwischen der vollen Zweiteilchendichtematrix und der faktorisierten Form entsprechen, werden vernachlässigt. Die TDHF-Näherung besteht darin, daß man die Vielteilchen Wellenfunktion durch eine Slaterdeterminante beschreibt. Diese Slaterdeterminante bleibt während des Stoßprozesses erhalten. Eng verknüpft mit dieser Eigenschaft ist die folgende: Die Einteilchen Wellenfunktionen bleiben für alle Zeiten orthogonal. Auch die Energieerhaltung ist eine Folge der Beschreibung durch eine Slaterdeterminante. Weiterhin sind die TDHF-Gleichungen normerhaltend bezüglich der Einteilchennorm. Ganz generell sind alle Größen erhalten, die durch Einteilchenoperatoren beschrieben werden können, wenn diese Operatoren mit dem Hamiltonoperator vertauschen, z.B. die Teilchenzahl, der Gesamtimpuls, der Gesamtdrehimpuls. Die Dichte erhält man aus den TDHF-Gleichungen durch

$$\rho(r,r',t) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(r,t) \psi_{\alpha}^*(r',t)$$

3 Lösung der TDHF-Gleichungen

3.1 Die gekoppelten Kanalgleichungen

Für die Lösung der zeitabhängigen Hartree-Fock-Gleichungen unterscheidet man prinzipiell zwei Möglichkeiten. Die erste besteht in der direkten Integration der TDHF-Gleichungen im Orts- bzw. Impuls-Raum. In der Atomphysik wurde diese Methode zuerst von Kulander, Sandhya Devi und Koonin [KUL82], später von Sandhya Devi und Garcia [SAN83] angewandt.

Die zweite Möglichkeit besteht in der Entwicklung der Einteilchen Wellenfunktionen nach einem vollständigen Satz von Basiszuständen

$$\psi_j(\underline{r}, R, t) = \sum_n c_n^j(t) \zeta_n(\underline{r}, R). \quad (3.1)$$

Schreibt man diesen Ansatz als Skalarprodukt zweier Vektoren, so erhält man:

$$\psi_j(\underline{r}, R, t) = \underline{\zeta}^T(\underline{r}, R) \underline{c}^j(t) \quad (3.2)$$

wobei der Index j für das j . Orbital steht. In dieser Schreibweise haben die TDHF-Gleichungen die Form:

$$i \frac{d}{dt} \underline{c}^j(t) = \underline{M}(t) \underline{c}^j(t) \quad (3.3)$$

wobei $\underline{S}$ die Überlappmatrix

$$S_{lm} = \langle \zeta_l | \zeta_m \rangle \quad (3.4)$$

und $\underline{M}(t)$ die Kopplungsmatrix

$$M_{lm} = \langle \zeta_l | H_{el}^{TDHF} - i \frac{d}{dt} | \zeta_m \rangle \quad (3.5)$$

beschreiben.

Die Anfangsbedingung wird so gewählt, daß die Entwicklung für $t \rightarrow -\infty$ gerade den atomaren Ausgangszustand beschreibt.

Diese sehr allgemeine Form der Matrixgleichung (3.3) ist der Ausgangspunkt aller Lösungsmethoden im Rahmen einer Entwicklung nach Basisfunktionen.

Man unterscheidet prinzipiell Entwicklungen nach atomaren Eigenfunktionen (AO), molekularen Eigenfunktionen (MO) und Entwicklungen nach einer unphysikalischen Basis. Je nach Wahl der Basis ergeben sich Vor- und Nachteile, so beschreiben Entwicklungen in einer atomaren Basis sehr gut die atomaren Anfangs- und Endzustände, man muß aber sehr viele Basisfunktionen heranziehen, um quasimolekulare Zwischenzustände, die sich in langsamen Stößen bei kleinen internuklearen Abständen ausbilden, darstellen zu können. Entwicklungen nach AO's beschreiben generell dann Atom-Atom bzw Ion-Atom Stöße gut, wenn die Abweichungen von atomaren Zustän-

den gering sind, also bei hohen Einschüßenergieen und großen Stoßparametern.

Genau das Gegenteil liegt bei einer Entwicklung nach Molekülorbitalen (MO) vor. Wird während eines langsamen Stoßes, bei kleinen internukleare Abständen, die atomare Struktur in der Elektronendichte aufgelöst, und bilden sich quasimolekulare Zwischenzustände aus, so sind MO's die optimalen Basisfunktionen. Schwierigkeiten bereitet dagegen die Darstellung von atomaren Wellenfunktionen bei großen internuklearen Abständen, bzw. hohen Energieen. Um die Nachteile der oben beschriebenen Entwicklungen zu vermeiden, die Vorteile aber zu nutzen, kann man beliebige Funktionensätze als Basis verwenden, solange sie nur vollständig sind. Bei der Wahl einer solchen unphysikalische Basis achtet man, neben der Forderung, daß die physikalischen Randbedingungen erfüllt werden können, auch auf die Berechenbarkeit der Matrixelemente. Man hätte gerne Entwicklungen, in denen die Kopplungsmatrixelemente wenigstens zum Teil analytisch zu berechnen sind. Der Vorteil einer Entwicklung nach unphysikalischen Basisfunktionen liegt in der Systemunabhängigkeit der Rechnungen. Sind die Matrixelemente erst einmal berechnet, so kann man die Methode auf beliebige Stoßsysteme anwenden, ohne erst die korrespondierende stationäre Schrödingergleichung zu lösen. Auch ist eine Vergrößerung der Basis, durch Hinzunahme von weiteren Basisfunktionen, im Allgemeinen leichter möglich als bei Entwicklungen nach einer physikalischen Basis.

Im Folgenden möchte ich einige Entwicklungen, in denen vergleichbare Rechnungen durchgeführt wurden, diskutieren.

Fritsch und Lin [FRI82] benutzen eine sogenannte AO^+ -Basis, bei der die Basisfunktionen durch die atomaren Eigenfunktionen der beiden Zentren, sowie durch die atomaren Eigenfunktionen des vereinigten Atoms (ua), zentriert auf den Ladungsschwerpunkt, gegeben sind. Die Nachteile der Entwicklung nach reinen AO's werden damit z.T. aufgehoben, durch die zusätzlich berücksichtigten Funktionen ist es möglich auch quasimolekulare

Zwischenzustände darzustellen. Die Bewegung der Elektronen mit den atomaren Zentren wird durch sogenannte Translationsfaktoren beschrieben. Durch das Studium des Korrelationsdiagramms werden die für den Stoßprozeß relevanten Funktionen gefunden, d.h. Eigenfunktionen die für den Streuvorgang ohne Bedeutung sind bleiben unberücksichtigt. Das begrenzt die Zahl der zu berechnenden Matrixelemente und damit auch die benötigte Rechenzeit. Neben der Möglichkeit stark asymmetrische Systeme rechnen zu können bietet dieses Verfahren einen weiteren Vorteil: Die Entwicklungskoeffizienten können asymptotisch, wegen der Berücksichtigung der Translationsfaktoren, direkt als Übergangswahrscheinlichkeiten interpretiert werden. Bis jetzt existieren Ergebnisse von AO^+ -Rechnungen allerdings nur für effektive Eielektronensysteme.

Entscheidende Bedeutung haben Translationsfaktoren in Basisentwicklungen nach Molekülorbitalen. Mit MO's alleine wäre es unmöglich sich bewegende atomare Wellenfunktionen darzustellen. Erst die Hinzunahme von mehr oder weniger willkürlichen Translationsphasen mit "Schaltparametern" erlaubt es hier, bewegte atomare Wellenfunktionen darzustellen. In einer Entwicklung nach MO's wurden Rechnungen für Zweielektronensysteme von Harel und Salin [HAR80] durchgeführt. Hierbei wurden Einteilchenorbitale nach Konfigurationen von MO's entwickelt und dann durch OEDEM Funktionen dargestellt. Wählt man hier nur die Zahl der Basisfunktionen groß genug, so erhält man ausgezeichnete Ergebnisse.

Im Rahmen einer Entwicklung nach unphysikalischen Basisfunktionen liegen bis jetzt keinerlei Rechnungen für Mehrelektronensysteme im Rahmen der TDHF-Näherung vor. Gramlich et al. [GRA84] beginnen aber die TDHF-Gleichungen in einer Entwicklung nach Gauß-Lobe-Funktionen zu lösen. Dabei verwenden sie Basisfunktionen zentriert auf die beiden Zentren, sowie auf den Ladungsschwerpunkt. Der Vorteil dieser Basis liegt darin, daß

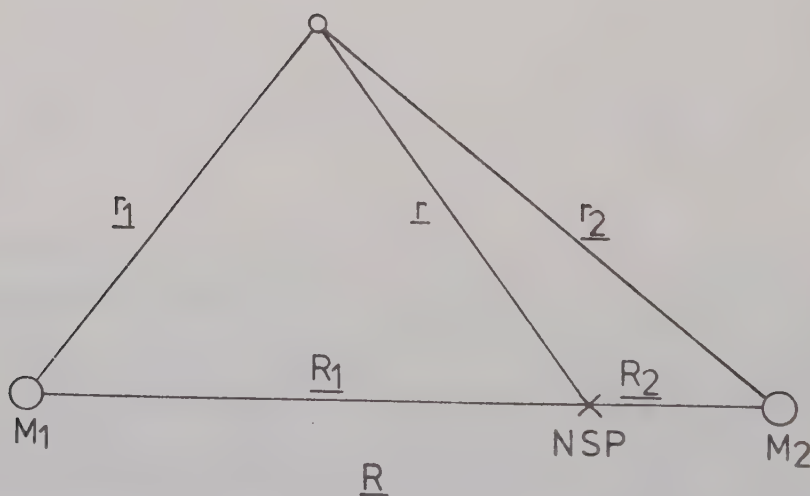
die Einbeziehung von ebenen Wellen als Translationsfaktoren gerade wieder Funktionen aus dem Basissatz liefert. Bis jetzt liegen aber noch keinerlei Ergebnisse vor.

3.2 Das rotierende Koordinatensystem

Die Beschreibung von Ion-Atom-Stößen erfolgt zweckmäßigerweise in einem um den Nukleonenschwerpunkt rotierenden Koordinatensystem.

Im Folgenden bezeichnen:

- $\underline{R}_i$ = Abstandsvektor des i. Kerns vom Schwerpunkt
- $\underline{R}$ = internuklearer Abstand = $\underline{R}_2 - \underline{R}_1$
- $\underline{r}$ = Abstandsvektor des Elektrons vom Schwerpunkt
- $\underline{r}_i$ = Abstandsvektor des Elektrons vom i. Kern
- Q_i = Kernladungszahl des i. Atoms
- M_i = Masse des i. Atoms
- v_i = Relativgeschwindigkeit des i. Atoms



Aus der klassischen Mechanik erhält man:

$$\underline{R}_i = \frac{\mu}{M_i} \underline{R} \quad ; \quad \underline{v}_i = \frac{\mu}{M_i} \underline{v} \quad ; \quad i = 1, 2$$

mit der reduzierte Masse $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$

3.3 Die Zweizentren-Basis

Grundlage der vorliegenden Arbeit ist ein Programm, das von Lüdde [LÜD81] zur Berechnung von Ion-Atom-Stößen mit einem Elektron entwickelt wurde. In diesem Programm, wie auch in dem für die TDHF-Rechnungen benutzten, wurden als Basisfunktionen Zwei-Zentren-Funktionen verwandt, wie sie von Hylleraas [HYL31] zur exakten Lösung des H_2^+ - Problems angewandt wurden:

$$\Phi_{nlm} = 1/(R/2)^{3/2} e^{-\kappa/2} (\xi^2 - 1)^{m/2} L_n^m(\kappa) P_l^m(\eta) \cos m\phi \quad (3.6)$$

mit

$$\kappa = \frac{\xi - 1}{a}.$$

ξ, η und ϕ sind elliptische Koordinaten, die mit den kartesischen Koordinaten durch folgende Relationen verknüpft sind:

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R} \quad ; \quad 1 \leq \xi < \infty$$

$$\eta = \frac{r_1 - r_2}{R} \quad ; \quad -1 \leq \eta \leq 1.$$

$$\phi = \arctan \frac{y}{x} \quad ; \quad 0 \leq \phi \leq 2 \pi$$

$$r_1 = (x_1^2 + y_1^2)^{1/2}$$

$$r_2 = (x_2^2 + y_2^2)^{1/2}$$

(3.7)

Die Flächen $\xi = \text{const.}$ beschreiben prolata Ellipsoide, $\eta = \text{const.}$ beschreiben Hyperboloide mit den Kernen in den Brennpunkten, $\phi = \text{const.}$ beschreibt Halbebenen unter dem Neigungswinkel ϕ gegenüber der x-y Ebene.

Bei den $L_n^m(\xi)$ und $P_l^m(\eta)$ handelt es sich um die verallgemeinerten Laguerre- bzw. Legendre-Polynome.

Die Hylleraasfunktionen bilden ein vollständiges Funktionensystem, sind aber nicht orthogonal. Mit diesen Basisfunktionen kann man nur gerade Zustände in ϕ beschreiben. Wegen der Vorgabe einer klassischen Bahn wird jedoch eine Streuebene (die x-z-Ebene) ausgezeichnet, die Lösung der TDHF-Gleichungen erfüllt deshalb zu jedem Zeitpunkt die Symmetrierelation

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, -y, z, t) ,$$

(3.8)

d.h. die Lösung der TDHF-Gleichungen ist zu allen Zeiten gerade in ϕ , es genügt deshalb die Entwicklung in der ϕ -Koordinate durch gerade Funktionen zu beschreiben.

In der Beschreibung durch Hylleraasfunktionen sind für große internukleare Abstände keine Kontinuumszustände enthalten.

Um die Wellenfunktion in ihrer Zeitentwicklung über den ganzen Stoßbereich darstellen zu können, verändere ich die Basis in folgender Weise:

R [a.u.]	n	l	m
R>12	3	16	3
12>R>7	4	12	3
7>R>2.5	6	8	3
R<2.5	8	6	3

Dies trägt dem Umstand Rechnung, daß man zur Darstellung einer atomaren Wellenfunktion mehr Legendrepolynome benötigt, während man für kleinere internukleare Abstände zunehmend mehr Laguerrepolynome heranziehen muß. Die Projektion von der einen Basis auf die andere erfolgt in der von Lüdde [LÜD81] angegebenen Weise.

Die Größe a ist ein Skalierungsparameter, der es ermöglicht direkt Einfluß auf die Asymptotik der Basisfunktionen zu nehmen. Um einen beliebigen Anfangszustand mit der n -Quantenzahl N optimal darstellen zu können, wähle ich, wie Lüdde:

$$a = \frac{N}{Q_T R} ,$$

(3.9)

wobei Q_T die Kernladungszahl des Targetatoms angibt. Im Verlauf der Rechnung ersetze ich Q_T für kleine internukleare Abstände allmählich durch

$$Q_{ua} = Q_T + Q_P ,$$

(3.10)

also durch die Kernladungszahl des vereinigten Atoms. Für die optimale Beschreibung von Ladungswechselreaktionen wird für $t \rightarrow \infty$ die Kernladungszahl des Projektils, Q_P , eingesetzt.

Da a vom internuklearen Abstand R abhängt, müßte man es in jedem Zeitschritt neu bestimmen, d.h. auch alle Matrixelemente neu bestimmen. Um die Struktur der Matrixelemente, sie zerfallen in einen R unabhängigen Anteil und einen R abhängigen Vorfaktor, auszunutzen, wird a nur alle zehn Zeitschritte neu bestimmt.

Die Wahl des Asymptotikparameters in der oben angegebenen Weise offenbart zwei gravierende Nachteile:

- i) bei heteronuklearen Stoßsystemen beschreibt a nur den asymptotischen Abfall der Wellenfunktion für einen Stoßpartner korrekt,
- ii) a ist nur optimal für eine Hauptschale N , während Zustände mit anderen n -Quantenzahlen schlechter repräsentiert werden.

Durch die große Zahl von Hylleraasfunktionen, die ich in diesen Rechnungen zur Darstellung der Lösung der TDHF-Gleichungen benutze (144 pro Einteilchen Wellenfunktion), werden sowohl atomare

Wellenfunktionen, bei großen internuklearen Abständen, als auch molekulare Wellenfunktionen, für kleine internukleare Abstände, zufriedenstellend dargestellt. Ein entscheidender Vorteil der Verwendung dieser Basis liegt darin, daß alle auftretenden Matrixelemente, einschließlich der Matrixelemente der Elektron-Elektron Wechselwirkung, analytisch berechnet werden können, was sich erheblich auf die benötigte Rechenzeit und die numerische Stabilität der Lösung auswirkt.

Ein weiterer Vorteil in der Verwendung einer unphysikalischen Basis liegt in der Unabhängigkeit vom jeweils betrachteten Stoßsystem. Ist das Programm erst einmal erstellt, so können die Rechnungen für beliebige Zweielektronensysteme durchgeführt werden.

3.4 Der elektronische Hamiltonoperator

Entscheidend für die Qualität der Lösung und die Komplexität der Rechnungen ist - neben der Wahl der Basis - welche Art von Kopplungen man berücksichtigt, d.h. die Wahl des elektronischen Hamiltonoperators.

Für TDHF-Rechnungen hat der Hamiltonoperator die Form:

$$H_{el}^{TDHF} = -1/2 \Delta_{\underline{r}} - Q_1/r_1 - Q_2/r_2 + V_{ee} \quad (3.11)$$

mit dem Elektron-Elektron Potential

$$V_{ee} = \int d^3r' \rho(\underline{r}', t) / |\underline{r} - \underline{r}'| - \int d^3r' \rho(\underline{r}, \underline{r}', t) / |\underline{r} - \underline{r}'| \quad (3.12)$$

Aus der Ableitung der Gleichungen in der SCA, sowie aus der Transformation der TDHF-Gleichungen in ein rotierendes Koordinatensystem, erhält man zusätzliche Terme für Radial- und Rotations-Kopplung.

Die TDHF-Gleichungen im rotierenden Koordinatensystem haben für ein Zweielektronensystem die Form:

$$i \frac{d}{dt} \Psi_j(\underline{x}, t) = \left[-i \frac{dR}{dt} \partial_R + i \frac{d\theta}{dt} (i l_y(\underline{r})) + H_{el}^{TDHF} \right] \Psi_j(\underline{x}, t)$$

(3.13)

wobei θ den Winkel angibt, um den das rotierende Koordinatensystem gegenüber dem Laborsystem gedreht ist. In der bisher verwendeten Matrixschreibweise:

$$\dot{\underline{c}}^j(t) = \underline{S}^{-1} \left[-\underline{R} + \underline{L} - i \left(\underline{T} - \underline{V}_{en} + \underline{V}_{ee} \right) \right] \underline{c}^j(t)$$

(3.14)

dabei bedeuten im Einzelnen:

$$(\underline{S})_{\alpha m, \beta m'} = \langle \alpha m | \beta m' \rangle = \delta_{mm'}, \quad \langle \alpha m | \beta m \rangle$$

die Überlappmatrix

$$(\underline{R})_{\alpha m, \beta m'} = \langle \alpha m | R \partial_R | \beta m' \rangle = \delta_{mm'}, \quad R \langle \alpha m | \partial_R | \beta m \rangle$$

die Radialkopplungsmatrix

$$(L)_{\alpha m, \beta m'} = \langle \alpha m | d\theta/dt | \beta m' \rangle$$

die Rotationskopplungsmatrix

$$(T)_{\alpha m, \beta m'} = \langle \alpha m | -1/2 \Delta | \beta m' \rangle = 1/2 \delta_{mm'} \langle \alpha m | \Delta | \beta m \rangle$$

die kinetische Energiematrix

$$(V_{en})_{\alpha m, \beta m'} = \langle \alpha m | -Q_1/r_1 - Q_2/r_2 | \beta m' \rangle = -\delta_{mm'} \langle \alpha m | Q_1/r_1 + Q_2/r_2 | \beta m \rangle$$

die Elektron-Nukleon Wechselwirkungsmatrix

α und β beschreiben die nl -Abhängigkeit der Hylleraasfunktionen. Auffallend ist, daß nur die Rotationskopplung Zustände mit verschiedenen m -Quantenzahlen koppelt.

Alle diese Matrixelemente lassen sich analytisch berechnen, und sind in der Dissertation von Lüdde [LÜD81] angegeben. Eine für die Durchführung der Rechnungen sehr angenehme Eigenschaft all dieser Kopplungsmatrizen besteht darin, daß sie in einen vom internuklearen Abstand unabhängigen Anteil, und einen einfachen R abhängigen Vorfaktor zerfallen. Das bedeutet für die praktische Rechnung, daß die Integrale in η nur einmal, und die Integrale in ξ nur bei einem Basiswechsel neu berechnet werden müssen.

Die Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkungsmatrixelemente soll im folgenden Kapitel, und im Detail im Anhang, beschrieben werden.

3.5 Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkung

Für die Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkung löse ich sowohl für den direkten Term, als auch für den Austauschterm die Poissongleichung:

$$\Delta_{\underline{r}} v^{kj}(\underline{r}, t) = -4\pi \phi_k^*(\underline{r}, t) \phi_j(\underline{r}, t) \quad (3.15)$$

Zur Lösung der Poissongleichung entwickle ich v^{kj} nach Hylleraasfunktionen:

$$v^{kj}(\underline{r}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{kj}(t) \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \quad (3.16)$$

Im folgenden soll der Index der Hylleraasfunktionen für die Quantenzahlen n, l, m stehen. Mit diesem Ansatz werden die f_{α}^{kj} aus dem folgenden linearen Gleichungssystem bestimmt:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{kj}(t) \langle \Phi_{\beta}(\underline{r}, R) | \Delta | \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \rangle \\ = -4\pi \sum_{\gamma} \sum_{\delta} c_{\gamma}^{k*}(t) c_{\delta}^j(t) \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) | \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die Diagonalelemente der f -Matrix sind reell, die Außerdiagonalen jedoch komplex. Man sieht sofort, daß folgende Beziehung gilt:

$$f_{\alpha}^{kj}(t) = (f_{\alpha}^{jk}(t))^*.$$

(3.18)

Die Matrixelemente für die Elektron-Elektron Wechselwirkung für die beiden TDHF-Gleichungen sind dann:

$$(V_{ee}^1)_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} [f_{\gamma}^{22}(t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} f_{\gamma}^{12}(t)] \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle$$

$$(V_{ee}^2)_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} [f_{\gamma}^{11}(t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} f_{\gamma}^{21}(t)] \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle$$

(3.19)

Die Elektron-Elektron Wechselwirkung koppelt ebenfalls Zustände mit unterschiedlichen m-Quantenzahlen.

Die sowohl bei der Berechnung des Potentials als auch bei der Berechnung der Matrixelemente auftretenden Dreifach-Integrale

$$\langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle$$

müssen für alle Quantenzahlen $\alpha = nlm$, $\beta = n'l'm'$, $\gamma = n''l''m''$ ausgerechnet werden. Die Rechenzeit hierfür beträgt für den von uns verwendeten Umfang der Basis ca. 90 sec.

Obwohl die TDHF-Gleichungen den Spin des Systems nicht verändern, der Spin ist eine Erhaltungsgröße, ist es doch essentiell für welchen Spinzustand die Rechnungen durchgeführt werden. Je nach Spinsingulett oder Spintriplett Anfangszustand hat man die TDHF-Gleichungen mit unterschiedlichen Austauschpotentialen zu lösen.

3.6 Anfangsbedingungen

Die Koeffizienten $c_\alpha(t \rightarrow -\infty)$ für den Beginn der Rechnungen erhalten ich aus der Projektion von bewegten atomaren Wellenfunktionen auf die Hylleraasbasis. Um die Bewegung der Elektronen mit dem zugehörigen Kern zu beschreiben, werden die stationären atomaren Wellenfunktionen $\tilde{\phi}$ Galilei transformiert:

$$\phi = \tilde{\phi} \exp(i(\underline{v} \cdot \underline{z} - v^2 t/2)) \quad (3.20)$$

und dann auf die Hylleraasfunktionen projiziert:

$$\sum_\alpha c_\alpha(t \rightarrow -\infty) \langle \tilde{\Phi}_\beta | \tilde{\Phi}_\alpha \rangle = \langle \tilde{\Phi}_\beta | \phi \rangle \quad (3.21)$$

Hierbei läßt sich eine Abschätzung des Energiebereichs, in dem solche Rechnungen sinnvoll sind, erkennen. Ist nämlich die Einschußenergie sehr groß, so oszilliert die Translationsphase sehr schnell. Das hat zur Folge, daß die bewegten atomaren Wellenfunktionen sehr schlecht in der Hylleraasbasis dargestellt werden, bzw. daß man, um eine vernünftige Darstellung zu erreichen, mehr Basisfunktionen mitnehmen müßte. Wegen der hierfür benötigten Rechenzeit, sowie dem benötigten Kernspeicher eines Computers ist dies unrealistisch, so daß für die vorliegenden Rechnungen eine Obergrenze in der Einschußenergie bei ca. 50 keV/Nukleon liegt.

Für Rechnungen mit einem Helium-Target im Grundzustand verwende ich als Anfangsbedingung Hartree-Fock-Roothan (HFR) Wellenfunktionen [CLE74]. Für alle anderen Rechnungen benutzte ich wasserstoffähnliche Wellenfunktionen. Für das System

$\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$ zeigte es sich jedoch, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht sensitiv auf die verwendeten Anfangsbedingungen sind.

3.7 Bemerkungen zur Numerik

In diesem Kapitel möchte ich auf einige Details bei der Lösung der TDHF-Gleichungen eingehen. Ausgangspunkt für die numerische Behandlung von Ion-Atom-Stößen mit zwei Elektronen war ein Programm, das von Lüdde [LÜD81] für Einelektron Stoßprobleme entwickelt worden war. Zur Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen verwende ich ein Adam-Peace Prädiktor-Korrektor Verfahren [SHA75]. Wegen der großen Zahl von Basisfunktionen (144 pro Orbital, das entspricht 288 komplexen Koeffizienten) bietet dieses Verfahren Vorteile gegenüber der Runge-Kutta Prozedur, die Lüdde in seiner Arbeit benutzte. Insbesondere die Tatsache, daß man mit einer konstanten Zeitschrittweite -üblicherweise .2 - rechnen kann, macht die Programme übersichtlicher. Die Projektion von verschiedenen Basissätzen auf auf solche mit einem anderen Asymptotikparameter, sowie die Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen führen zu einem gewissen Normverlust. Dieser Normverlust hat liegt in der numerischen Genauigkeit begründet, und darf nicht als Ionisation interpretiert werden. Betrachtet man aber das Verhalten der Elektronendichte in der Reaktionszone (siehe Kapitel 6), so kann man einen Teil des Normverlusts, für kleine internukleare Abstände, durchaus als Verluste durch Ionisation erklären. Für das Stoßsystem $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$ liegen die Normverluste bei ungefähr 3%. Sind anfänglich die Ortsanteile der beiden Einteilchen Wellenfunktionen gleich, $\phi_1(t \rightarrow -\infty) = \phi_2(t \rightarrow -\infty)$, so sind die beiden TDHF-Gleichungen identisch, es genügt dann eine einzige zu lösen. Dies wirkt sich erheblich auf die benötigte Rechenzeit aus. Bei allen

Rechnungen, außer für $\text{Li}^{3+} + \text{He}(^1\text{S})$, für das größere Stoßparameter Beiträge für Wirkungsquerschnitte liefern, startete ich die Rechnungen bei einem internuklearen Abstand von 10 a.u. und rechnete bis zu einer Separation von ebenfalls 10 a.u.. Mit der oben angegebenen Zeitschrittweite bedeutet das, daß man ungefähr 220 - 250 Zeitschritte, je nach Stoßparameter, benötigt. Die Rechnungen für das Li^{3+} Projektil startete ich bei einem Anfangsabstand von 15 atomaren Einheiten und ging bis zu einem Endabstand von ebenfalls 15 a.u.. Typische Rechenzeiten für eine Einschußenergie von 5 keV/amu, bei unterschiedlichen Orbitalen, betragen 10000 sec auf der IBM 3081 der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI). Sind die beiden Orbitale gleich, d.h. man führt die Rechnungen nur für ein Orbital durch, so verkürzt sich die Rechenzeit auf etwa 4000 sec. Dabei erfordert die Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkungsmatrixelemente in etwa die gleiche Zeit wie die Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen. Der für diese Rechnungen benötigte Speicherplatz beträgt 5 Megabyte.

4 Die Berechnung von Uebergangswahrscheinlichkeiten

Die Verwendung einer unphysikalischen Basis erlaubt es nicht, die Entwicklungskoeffizienten für $t \rightarrow \infty$ als Übergangswahrscheinlichkeiten zu interpretieren. Um ein Resultat bezüglich der Besetzung von Target- bzw. Projektilwellenfunktionen zu erhalten, muß man die Lösung der TDHF-Gleichungen auf die verschiedenen Endkanäle projizieren. Voraussetzung hierfür ist, daß die internukleare Separation so groß ist, daß der Überlapp zwischen Target- und Projektil-Orbitalen verschwindet. Bei meinen Rechnungen beträgt der internukleare Abstand für den Endpunkt der Rechnungen typischerweise 10 a.u.. Da die TDHF-Näherung darin besteht, daß sich die Vielteilchenwellenfunktion aus einer Slaterdeterminante aus Eielektronen Wellenfunktionen zusammensetzt, und diese Slaterdeterminante während des ganzen Stoßes erhalten bleibt, hat man, um aus der asymptotischen Streulösung die gewünschten Informationen herausziehen zu können, die Slaterdeterminante der Lösung auf alle möglichen Slaterdeterminanten von Endkonfigurationen zu projizieren. Je nach vorgegebener Anfangsbedingung, bei diesen Rechnungen je nach Art des berücksichtigten Austauschpotentials, hat man als Endkonfiguration Singulett bzw. Triplett Zustände zu betrachten. Die Durchführung dieser Projektionen liefert als Ergebnis für ein Zweielektronensystem die Aussage: Ein Elektron befindet sich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit im Zustand a, und das andere gleichzeitig im Zustand b, wobei für einen Singulettzustand a gleich b sein kann. Die Projektion auf Kanäle liefert also Kenntnis über den Zustand beider Elektronen. Solch detaillierte Information ist im allgemeinen nicht verfügbar. Üblicherweise wird im Experiment nur der Zustand eines der Stoßpartner gemessen, das entspricht der Aussage: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür ein Elektron in einem bestimmten Niveau zu finden, während das andere Elektron in jedem beliebigen Zustand sein kann. Diese Wahrscheinlichkeit wird als inklusive Übergangswahrscheinlichkeit bezeichnet. Ist man nicht an einer detaillierten Angabe über den Zustand der Elektronen nach

dem Stoß interessiert, sondern möchte pauschale Aussagen, wie z.B. wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für Einelektroneneinfang in das Projektil, so hat man alle Kanäle, die solch eine Verteilung beinhalten, zu addieren. Man muß dabei aber sicher sein, daß man alle für das Problem relevanten Projektionen durchgeführt hat. Eine einfachere Methode globale Übergangswahrscheinlichkeiten direkt aus der Vielteilchendichte im Projektil- bzw. Targethalbraum zu erhalten wurde von Lüdde [LÜD83] angegeben. Im folgenden werde ich alle drei Methoden zur Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten aus der Lösung der TDHF-Gleichungen speziell für Zweielektronensysteme kurz skizzieren.

4.1 Projektion auf Endkanäle

Ich will zunächst auf die Kanalanalyse der asymptotischen Lösung der TDHF-Rechnungen für zwei Elektronen unterschiedlicher Spinorientierung eingehen. In diesem Fall werden die TDHF-Gleichungen ohne das komplexe Austausch-Potential gelöst. Die asymptotische Streuwellenfunktion ist dann die Slaterdeterminante eines Singulett-Zustands und wird auf eine Slaterdeterminante projiziert, die einen Singulett-Zustand beschreibt. Auszurechnen ist der Überlapp:

$$|\langle \Phi_1 | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle|^2$$

(4.1)

Ein Singulettzustand läßt sich als Summe zweier Slaterdeterminanten schreiben, die sich nur im Spinanteil unterscheiden:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+\delta}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\chi_1(1) & \phi_1(2)\chi_1(2) \\ \phi_2(1)\chi_2(1) & \phi_2(2)\chi_2(2) \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_2(2)\chi_1(2) & \phi_2(1)\chi_1(1) \\ \phi_1(2)\chi_2(2) & \phi_1(1)\chi_2(1) \end{vmatrix} \right] \quad (4.2)$$

d.h. tatsächlich hat man den Überlapp von einer Summe von zwei Slaterdeterminanten mit einer Summe von zwei Slaterdeterminanten, insgesamt also vier Überlappmatrizen, auszurechnen. Wegen der Spinorthogonalität sind zwei dieser Überlappmatrizen jedoch identisch Null, und bei den beiden verbleibenden Determinanten tragen, ebenfalls wegen der Spinorthogonalität, nur die Hauptdiagonalen bei, so daß man das Ergebnis erhält:

$$\langle \Phi_1 | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle = 1/(1+\delta) [\langle \phi_1 | \psi_1 \rangle \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle + \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle]$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad \delta &= 0 \quad \text{für } \phi_1 \neq \phi_2 \\ &= 1 \quad \text{für } \phi_1 = \phi_2 \end{aligned}$$

(4.3)

Ein Spintriplett-Zustand kann durch drei verschiedene Zweiteilchenwellenfunktionen charakterisiert werden:

$$\Phi = \begin{vmatrix} \phi_1(1)\chi_1(1) & \phi_2(1)\chi_1(1) \\ \phi_1(2)\chi_1(2) & \phi_2(2)\chi_1(2) \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Phi &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\chi_1(1) & \phi_2(1)\chi_1(1) \\ \phi_1(2)\chi_2(2) & \phi_2(2)\chi_2(2) \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\chi_2(1) & \phi_2(1)\chi_2(1) \\ \phi_1(2)\chi_1(2) & \phi_2(2)\chi_2(2) \end{vmatrix} \right] \\ \Phi &= \begin{vmatrix} \phi_1(1)\chi_2(1) & \phi_2(1)\chi_2(1) \\ \phi_1(2)\chi_2(2) & \phi_2(2)\chi_2(2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Da der Überlapp von jeweils zweien dieser Triplettzustände, wegen der Spinorthogonalität, immer verschwindet, und sich Φ_{3_1} und $\Phi_{3_{-1}}$ nur im Spinanteil unterscheiden, verbleiben noch folgende Projektionen:

$$\begin{aligned} &|\langle \Phi_{3_1} | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle|^2 \\ &|\langle \Phi_{3_0} | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Spinorthogonalität läßt einige Matrixelemente verschwinden, und man erhält das Ergebnis:

$$\langle \Phi_{3_1} | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle = \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle - \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle$$

$$= \langle \Phi_{30} | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle$$

(4.6)

In dieser Auswertung ist explizit das Pauli-Prinzip enthalten. Ist $\phi_1 = \phi_2$, so verschwindet der Überlapp.

4.2 Berechnung von pauschalen Uebergangswahrscheinlichkeiten

Ist man nur an pauschalen Aussagen, wie z.B. den Wahrscheinlichkeiten für Ein- oder Zweielektroneneinfang interessiert, und nicht am Einfang in bestimmte Kanäle, so hat man eine große Zahl von Projektionen auf mögliche Endkonfigurationen durchzuführen, und die einzelnen Wahrscheinlichkeiten zu addieren. Dabei muß man sicher sein, daß man alle wichtigen Kanäle berücksichtigt hat. Man kann die globalen Übergangswahrscheinlichkeiten aber auch direkt aus der asymptotischen Lösung der TDHF-Gleichungen gewinnen [LÜD83]. Hierbei nimmt man an, daß sich die Elektronen nach dem Stoß entweder beim Projektil oder beim Targetatom befinden, Ionisation soll also ausgeschlossen werden. Sind die beiden Zentren soweit voneinander entfernt, daß sich ihre atomaren Wellenfunktionen nicht überlappen, so kann man die Lösungswellenfunktion nach einen Satz von Slaterdeterminanten entwickeln, die die Target und Projektilzustände beschreiben. Die Wellenfunktion für ein Stoßsystem mit zwei Elektronen kann in der Form

$$\Psi(x_1, x_2, t \rightarrow \infty) = \sum_{\alpha} (a_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{PP} + b_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{PT} + c_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{TP} + d_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{TT})$$

(4.7)

geschrieben werden. Die Φ_α beschreiben die Slaterdeterminanten der möglichen Endkonfigurationen, P steht für Projektilhalbraum, T für Targethalbraum. Definiert man nun:

$P_{20} = \sum_\alpha |a_\alpha|^2$ als Wahrscheinlichkeit dafür, beide Elektronen beim Projektil zu finden,

$P_{11} = \sum_\alpha |b_\alpha|^2 + |c_\alpha|^2$ als Wahrscheinlichkeit dafür ein Elektron beim Target und ein Elektron beim Projektil zu finden,

$P_{02} = \sum_\alpha |d_\alpha|^2$ als Wahrscheinlichkeit dafür, daß beide Elektronen beim Target bleiben,

so kann man diese Übergangswahrscheinlichkeiten durch Kombinationen von Integralen über die einzelnen Halbräume ausdrücken:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle_{PP} = \sum |a_\alpha|^2 = P_{20}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle_{TT} = \sum |d_\alpha|^2 = P_{02}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle_{PT} = \sum |b_\alpha|^2 = P_{10}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle_{TP} = \sum |c_\alpha|^2 = P_{12}$$

(4.8)

Für einen Singulett Zustand sind die beiden Übergangswahrscheinlichkeiten P_{10} und P_{12} gleich, und die Einelektronen Einfangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch:

$$P_{11} = 2P_{12} = 2P_{10}$$

(4.9)

Für den Singulett-Zustand erhält man folgende einfache Beziehungen:

$$P_{20} = \langle \Psi | \Psi \rangle_{PP} = \langle \psi | \psi \rangle_P^2$$

$$P_{11} = 2 \langle \Psi | \Psi \rangle_{PT} = 2 \langle \psi | \psi \rangle_P \langle \psi | \psi \rangle_T$$

$$P_{02} = \langle \Psi | \Psi \rangle_{PP} = \langle \psi | \psi \rangle_P^2$$

(4.10)

nimmt man an, daß keinerlei Ionisation auftritt, dann kann man die Einelektronen-Einfangswahrscheinlichkeit durch die Zweielektronen-Einfangswahrscheinlichkeit ausdrücken:

$$P_{10} = 2 (\sqrt{P_{20}} - P_{20})$$

(4.11)

Mit dieser einfachen Beziehung verifiziert man auch die bereits von Lichten [LIC63] in einem einfachen Modell aufgestellten Forderungen:

- a) Die Zweielektronen-Übergangswahrscheinlichkeit läuft zwischen 0 und 1, während die Einelektronen Einfangswahrscheinlichkeiten zwischen 0 und .5 laufen.

b) Wenn P_{20} als Funktion des Stoßparameters (Energie) oszilliert, dann oszilliert P_{10} als Funktion des Stoßparameters (Energie) genau doppelt so oft.

Für einen Triplett-Anfangszustand kann man die pauschalen Übergangswahrscheinlichkeiten in der gleichen Form angeben, die beiden Anteile der Eielektronen Übergangswahrscheinlichkeit P_{11} sind jetzt aber verschieden:

$$\begin{aligned}
 P_{20} &= \langle \Psi | \Psi \rangle_{PP} = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle_P \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle_P - \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle_P \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_P \\
 P_{10} &= \langle \Psi | \Psi \rangle_{TP} = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle_P \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle_T + |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_P|^2 \\
 P_{21} &= \langle \Psi | \Psi \rangle_{PT} = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle_T \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle_P + |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_T|^2 \\
 P_{02} &= \langle \Psi | \Psi \rangle_{TT} = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle_T \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle_T - \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle_T \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_T
 \end{aligned}
 \tag{4.12}$$

4.3 Die Berechnung von inklusiven Wahrscheinlichkeiten

Die Angabe von inklusiven Übergangswahrscheinlichkeiten entspricht dem, was üblicherweise im Experiment gemessen wird. Man interessiert sich hierbei für die Wahrscheinlichkeit ein Elektron in einem definierten Zustand zu finden, während das andere in jedem beliebigen Zustand sein kann. Im Folgenden werde ich die inklusive Wahrscheinlichkeit dafür, genau ein Elektron im 2s Niveau des Projektils zu finden für einen Spinsingulett und einen Spintriplett Fall angeben. Eine detailliertere Rechnung, auch für Mehrteilchen-Konfigurationen findet man bei Lüdde [LÜD84].

Die inklusive Wahrscheinlichkeit dafür, genau ein Elektron im 2s Zustand zu finden, setzt sich zusammen aus der Wahrscheinlichkeit ein Elektron im 2s Niveau und gleichzeitig ein Loch mit entgegengesetztem Spin im 2s Niveau zu finden. Im folgenden beschreiben hochgesetzte Indizes Löcher und tiefgesetzte Indizes Elektronen. Da das Elektron in verschiedenen Spinzuständen sein kann, setzt sich die Wahrscheinlichkeit aus zwei Anteilen zusammen:

$$P_{\text{ink}}(2s) = P_{2s\uparrow}^{2s\downarrow} + P_{2s\downarrow}^{2s\uparrow} \quad (4.13)$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Vorhandensein genau eines Elektrons im 2s Zustand ist die Wahrscheinlichkeit dafür, überhaupt ein Elektron im 2s Niveau zu finden, abzüglich der Wahrscheinlichkeit zwei Elektronen im 2s Zustand zu haben.

$$P_{2s\uparrow}^{2s\downarrow} = P_{2s\uparrow} - P_{2s\uparrow 2s\downarrow}$$

dabei sind im Einzelnen:

$$P_{2s\uparrow} = \langle \phi_{2s} | \rho^+ | \phi_{2s} \rangle$$

$$P_{2s\uparrow 2s\downarrow} = \rho_{2s 2s}^+ \rho_{2s 2s}^-$$

$$\rho_{2s 2s}^+ = \langle \phi_{2s} | \rho^+ | \phi_{2s} \rangle$$

$$\rho_{2s 2s}^- = \langle \phi_{2s} | \rho^- | \phi_{2s} \rangle$$

(4.14)

wobei die ρ^+ und ρ^- gerade die Dichtematrix beschreiben.

Den Singulett Zustand kann man durch zwei mögliche Spinverteilungen angeben:

$$\text{a) } \text{Spin}(\psi_1) : \uparrow \quad \text{Spin}(\psi_2) : \downarrow$$

$$\text{b) } \text{Spin}(\psi_1) : \downarrow \quad \text{Spin}(\psi_2) : \uparrow$$

Für Fall a ergibt sich für die Dichtematrizen:

$$\rho^+ = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \quad \rho^- = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$$

Damit erhält man für Fall a:

$${}_a P_{2s\uparrow}^{2s\downarrow} = |c_{2s}^1|^2 - |c_{2s}^1|^2 |c_{2s}^2|^2 \quad (4.15)$$

und entsprechend für den Fall b:

$${}_b P_{2s\uparrow}^{2s\downarrow} = |c_{2s}^2|^2 - |c_{2s}^2|^2 |c_{2s}^1|^2 \quad (4.16)$$

wobei die c_{2s}^i gerade die Projektion des i. Orbitals der Lösung der TDHF-Gleichungen auf den 2s Zustand des Projektils beschreiben. Berücksichtigt man alle möglichen Spinzustände, und addiert die

möglichen Wahrscheinlichkeiten, so erhält man für die inklusive Wahrscheinlichkeit dafür genau ein Elektron im 2s Niveau zu finden:

$$P_{\text{ink}}(2s) = |c_{2s}^1|^2 + |c_{2s}^2|^2 - 2|c_{2s}^1|^2|c_{2s}^2|^2 \quad (4.17)$$

Einfacher sind die Rechnungen für den Triplettfall. Wegen des Pauliprinzips können hier nie zwei Elektronen gleichzeitig im 2s Zustand sein, so daß der Term $P_{2s\uparrow 2s\uparrow}$ verschwindet. Für den Fall, daß die Spins beider Elektronen im "up" Zustand sind erhält man:

$${}^{\uparrow\uparrow}P_{2s\uparrow}^{2s\downarrow} = \sum_{k=1}^2 |c_{2s}^k|^2 \quad (4.18)$$

das gleiche Ergebnis erhält man natürlich auch für den "down down" Zustand, so daß die inklusive Wahrscheinlichkeit dafür, genau ein Elektron im 2s Niveau zu finden, gegeben ist durch:

$$P_{\text{ink}}(2s) = |c_{2s}^1|^2 + |c_{2s}^2|^2 \quad (4.19)$$

4.4 Berechnung von Wirkungsquerschnitten

Um meine Ergebnisse mit denen anderer Rechnungen, oder mit vorliegenden experimentellen Daten, vergleichen zu können, muß man aus den Übergangswahrscheinlichkeiten $P(b)$ die Wirkungsquerschnitte $\sigma(E)$ für die jeweilige Reaktion berechnen.

Kennt man die Übergangswahrscheinlichkeit in einen bestimmten atomaren Endzustand $|nlm\rangle$, so ist der Zusammenhang mit dem totalen Wirkungsquerschnitt gegeben durch:

$$\sigma_{nlm}(E) = 2\pi \int db \, b \, P_{nlm}(b) \quad (4.20)$$

Je nach Verlauf der $P(b)$ -Kurven genügen unter Umständen schon wenige Punkte, um die Integration durchführen zu können. Bei resonanten Reaktionen, wie z.B. beim Ladungswechsel im $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$ -Stoß, benötigt man, wegen des oszillatorischen Verhaltens, jedoch viele Übergangswahrscheinlichkeiten um die Struktur der $P(b)$ -Kurven auflösen zu können.

Durch die Wichtung der Übergangswahrscheinlichkeiten mit dem Stoßparameter kommen die entscheidenden Beiträge zu den Wirkungsquerschnitten von Übergangswahrscheinlichkeiten bei großen Stoßparametern, während die Beiträge für kleine Stoßparameter vernachlässigbar sind.

Für die Berechnung differentieller Wirkungsquerschnitte haben McCarrol und Salin [MCC68] im Rahmen der SCA folgende Beziehung angegeben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi\mu^2 v^2 \left| \int_0^\infty b \, db \, P_{nlm}(b) J_m(\eta b) \right|^2$$

$$\eta = 2\mu v \sin \frac{\theta}{2}$$

(4.21)

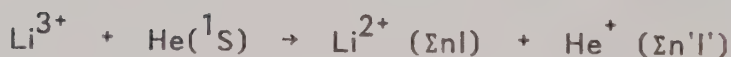
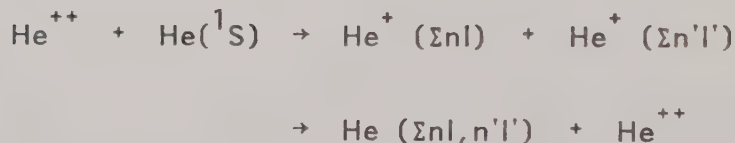
Dabei bedeuten: θ der Streuwinkel im Schwerpunktsystem und J_m die Besselfunktion m -ter Ordnung. Der Integrand ist wegen der Besselfunktionen eine sehr schnell oszillierende Funktion. Um diese große Zahl von Oszillationen auflösen zu können, müßte man für einen differentiellen Wirkungsquerschnitt bis zu 80 mal die TDHF-Gleichungen für verschiedenen Stoßparameter lösen. Wegen der enormen Rechenzeit, die hierfür benötigt würde, habe ich auf die Berechnung differentieller Wirkungsquerschnitt verzichtet.

5 Ergebnisse fuer Stoesse von nackten Ionen auf ein Heliumatom im Grundzustand

In diesem Kapitel will ich die Ergebnisse für Stöße von nackten Kernen auf ein Heliumtarget im Grundzustand vorstellen. Für diese Rechnungen ist die gesamte Elektron-Elektron Wechselwirkung, wegen der Spinartung, gerade durch die Hälfte des direkten Terms gegeben. Weiterhin sind beide Orbitale gleich und entwickeln sich auch in der gleichen Weise, d.h. man braucht für die Rechnung nur ein Orbital zu betrachten.

Als ersten Test für die ausreichende Größe der Basis, sowie das ordnungsgemäße Arbeiten des Poissonsolvers, untersuchte ich das inertial bewegte Heliumatom. Das entspricht dem Streusystem $\text{He}(1s^2) + n$. Für dieses System zeige ich die zeitliche Entwicklung der Elektronendichte.

Pauschale Wirkungsquerschnitte berechnete ich für folgende Reaktionen:



Neben der Präsentation der Ergebnisse, sowie dem Vergleich mit anderen Rechnungen und experimentellen Daten, werde ich aber auch auf einige Resultate eingehen, die man aus der Rechnung erhält, die aber nicht durch meßbare Größen repräsentiert werden, wie z.B. die zeitliche Entwicklung der Dichte oder die zeitliche Entwicklung der Übergangswahrscheinlichkeiten.

5.1 Das inertial bewegte Heliumatom

Ein Test für die Qualität der Lösung der Poissongleichung, sowie die ausreichende Größe der Basis, ist das inertial bewegte Heliumatom. In meinem Programm entspricht das dem Stoßsystem $\text{He}(1s^2) + n$. Für die Zweizentrenbasis ist dies ein sehr harter Test, da man über einen großen Bereich internuklearer Abstände hinweg atomare Wellenfunktionen durch Zweizentrenfunktionen beschreiben muß. Wäre die Lösung der Poissongleichung zu ungenau, oder die Zahl der Basisfunktionen zu gering, so würde man in der zeitlichen Entwicklung der Elektronendichte Deformationen beobachten, während eine ungestörte Bewegung des Heliumatoms den Schluß zuläßt, daß sowohl die Poissongleichung vernünftig gelöst wird, als auch die Zahl der Basisfunktionen ausreichend groß ist.

In der folgenden Serie von Bildern zeige ich die Elektronendichte für verschiedene internukleare Abstände. Gezeichnet ist jeweils die Dichte in der Streuebene im rotierenden Koordinatensystem. Die z-Achse verläuft hier mit der Verbindungslinie der beiden Kerne, d.h. das Target läuft von links bis zum Punkt der größten Annäherung (closest approach) und läuft wieder nach links hinaus. Für kleine internukleare Abstände entsprechen die Dichtelinien der Konturplots den Werten .02, .06, .18, .54, 1.62, 4.86, d.h. äquidistante Konturlinien entsprechen einem exponentiellen Verlauf der Dichte. Die Bilder zeigen die ungestörte Bewegung eines Heliumatoms mit der Einschußenergie von 5 keV/Nukleon und einem Stoßparameter von 0.5 a.u. über den gesamten Streubereich, unphysikalische Kopplungen treten nicht auf, die Form der Elektronendichte bleibt erhalten, d.h. auch die Translationsfaktoren werden durch die Zweizentren-Basis gut dargestellt.

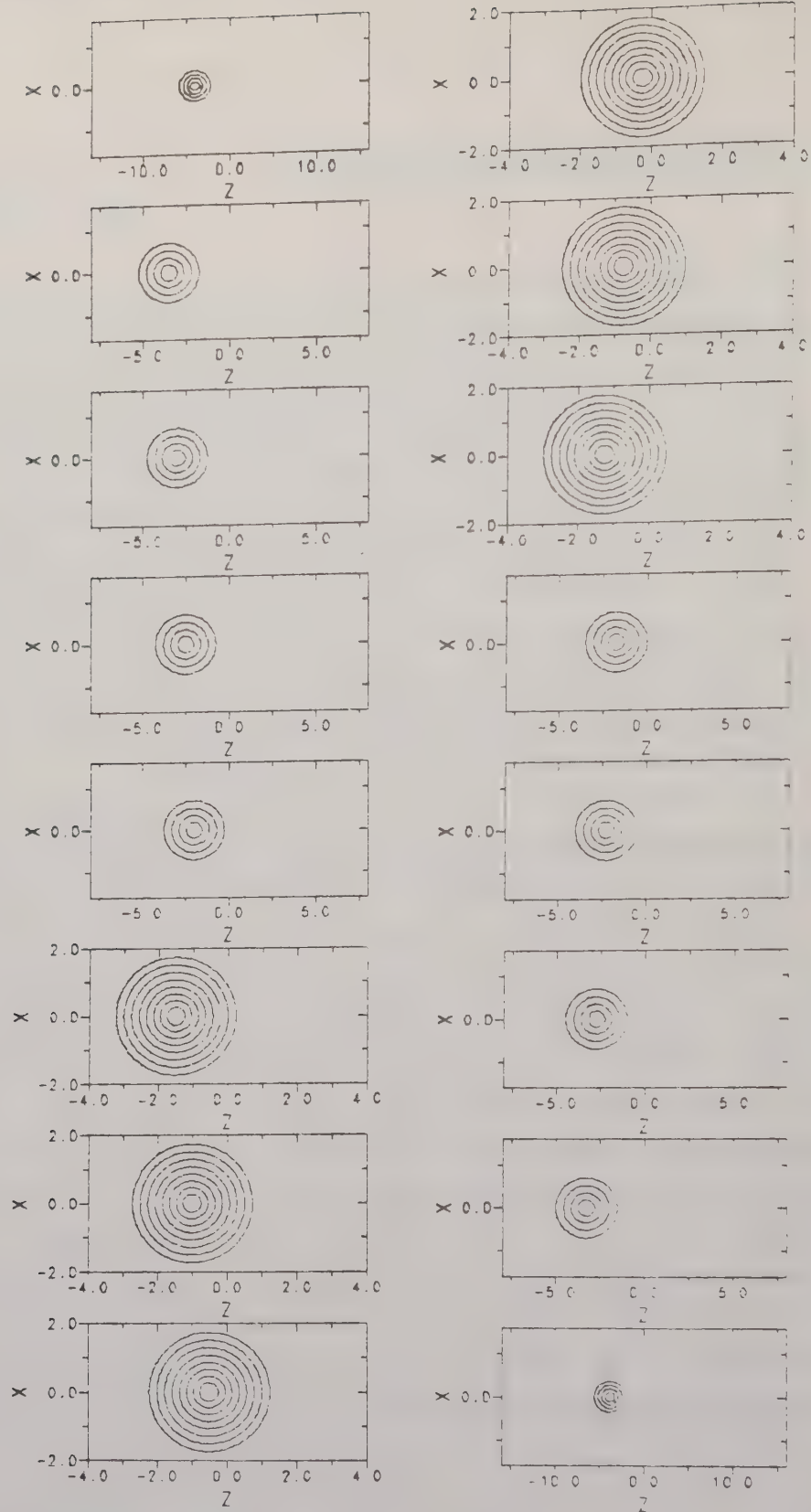


Bild 1: inertial bewegtes Heliumatom; linke Reihe einlaufender Bereich, rechte Reihe auslaufender Bereich.

5.2 Das System $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Untersuchung des homonuklearen Stoßsystems $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$. Gerade dieses System ist in der Vergangenheit von einigen Experimentatoren sehr sorgfältig vermessen worden [AFR78, BER68], und auch einige theoretische Arbeiten [HAR80, SAN83] bieten mir die Gelegenheit Vorteile und auch Unzulänglichkeiten meiner Rechnungen zu erkennen. Bei diesem Stoßsystem interessierte ich mich, wegen der grundsätzlichen Bedeutung, neben physikalisch meßbaren Größen, wie Wirkungsquerschnitte für Ein- und Zweielektroneneinfang, auch für die zeitliche Entwicklung der Elektronendichte und die zeitliche Entwicklung der Einfangwahrscheinlichkeiten. Weiterhin untersuchte ich den Einfluß der Elektron-Elektron Wechselwirkung, indem ich die Rechnungen für den Fall ohne Elektron-Elektron Potential, für den Fall der Einbeziehung des direkten Terms und mit der Berücksichtigung der vollen Elektron-Elektron Wechselwirkung durchführte. Es zeigt sich, daß der Verlauf der $P(b)$ Kurven drastisch mit der Art der berücksichtigten Elektron-Elektron Wechselwirkung verändert wird. Damit ändern sich auch die Wirkungsquerschnitte, und zwar weit stärker, als man es aus dem Einfluß des Elektron-Elektron Potentials in der stationären Atomphysik erwarten würde.

Da die Energieniveaus der beiden Zentren identisch sind, ist der Resonanzeinfang der dominante Reaktionskanal, d.h. es werden Oszillationen in der Elektronendichte zwischen den beiden Zentren zu beobachten sein.

5.2.1 Die zeitliche Entwicklung der Elektronendichte

Die folgende Serie von Bildern zeigt die zeitliche Entwicklung der Elektronendichte in der Streuebene als 3-D-Zeichnungen und Konturplots im rotierenden Koordinatensystem. Deutlich zu erkennen ist, daß das Target im einlaufenden Bereich sehr lange nichts von dem sich nähernden Projektil spürt. Erst kurz vor dem Erreichen des Minimalabstandes "sieht" die Elektronenwolke das attraktive Potential des α -Teilchens. Langsam weicht die Kugelsymmetrie des $1s^2$ -Zustandes auf und man beobachtet eine Ausrichtung auf das Projektil. Im weiteren Stoßverlauf zieht nun das Projektil die ganze Elektronenwolke an sich, dadurch wird das Target seinerseits attraktiv. Die Elektronen oszillieren zwischen den beiden Kernen hin und her, zwischenzeitlich sind molekülähnliche Orbitale zu erkennen. Deutlich zu erkennen ist der Einfluß der Rotationskopplung, die gerade die Zylindersymmetrie zerstört. Die Oszillationen der Elektronendichte finden ihr Ende bei größer werdendem internuklearen Abstand, die gemeinsamen Dichtelinien reißen auseinander, jeder der Stoßpartner behält einen Teil der Elektronenwolke, die sich im weiteren Verlauf stabilisiert und wieder atomares Verhalten annimmt. Diese saubere Trennung, sowie das stabile Verhalten der Elektronendichte im asymptotischen Bereich, liefern die Rechtfertigung für die Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten. Das Auftreten dieser heftigen Oszillationen ist ein typisches Kriterium einer Resonanzreaktion. Die Bilder dieser Serie entstammen einer Rechnung mit einer Einschußenergie von 5 keV / Nukleon bei einem Stoßparameter von .8 a.u..

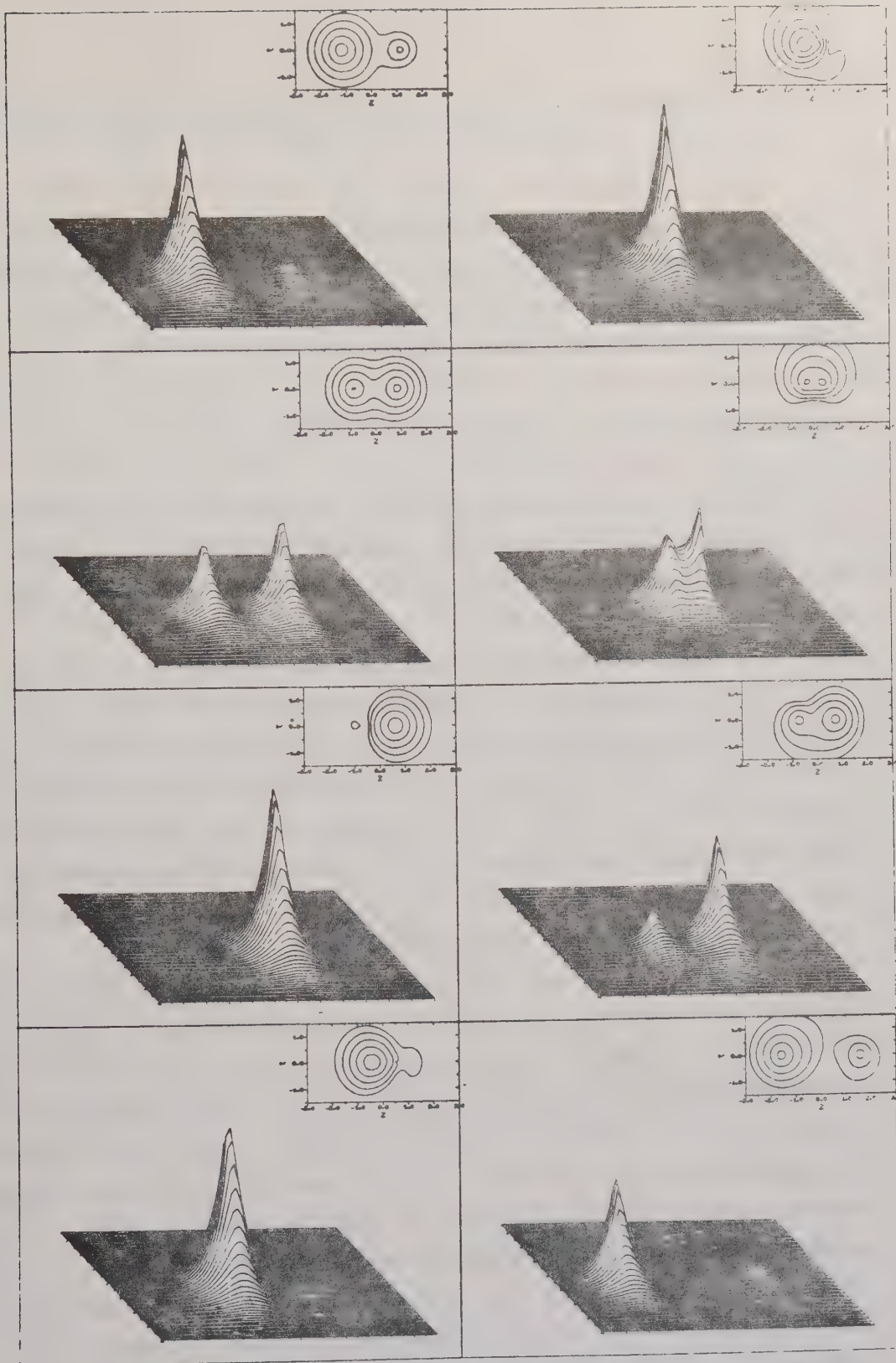


Bild 2: zeitliche Entwicklung der Dichte; linke Reihe einlaufender Bereich, rechte Reihe auslaufender Bereich.

5.2.2 Die zeitliche Entwicklung der "Einfangswahrscheinlichkeiten"

Deutlicher zu erkennen ist die Resonanzstruktur wenn man die zeitliche Entwicklung der Zweielektronen Einfangswahrscheinlichkeit als Funktion der Zeit aufträgt. Es muß jedoch betont werden, daß die Interpretation der Größe

$$P_{20} = \langle \psi | \psi \rangle_P \langle \psi | \psi \rangle_P$$

als Zweielektronen Einfangswahrscheinlichkeit nur in der zeitlichen Asymptotik gilt, für kleine internukleare Abstände ist P lediglich ein Mass dafür, wieviel der Elektronendichte sich im Target- bzw. im Projektilhalbraum befindet.

Ich berechnete die Übergangswahrscheinlichkeiten als Funktion der Zeit aus Lösungen der TDHF-Gleichungen für den Fall ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung (durchgezogene Kurve), für den Fall, daß nur der direkte Term miteinbezogen wurde (gestrichelte Linie), sowie die volle Berücksichtigung der Elektron-Elektron Wechselwirkung (gepunktete Linie). Die in Bild 3 gezeigten Resultate entstammen einer TDHF-Rechnung mit einer Einschußenergie von 5 keV / Nukleon mit einem Stoßparameter von .8 a.u..

Allen Kurven gemeinsam ist der stabile Verlauf im einlaufenden Bereich, ein weiteres Indiz für die ausreichende Anzahl von Basisfunktionen, es treten keine unphysikalischen, langreichweitigen Kopplungen auf. Ungefähr beim Erreichen des Minimalabstandes schnellte die "Einfangswahrscheinlichkeit" hoch und oszilliert einigemal zwischen Null und Eins, das bedeutet die Dichte oszilliert nahezu vollständig zwischen den beiden Zentren hin und her. Für größere Zeiten pendelt sich die Einfangswahrscheinlichkeit auf einen nahezu konstanten Wert ein. Konstant wird die Übergangswahrscheinlichkeit nur für den Fall ohne jede Elektron-Elektron Wechselwirkung, während in den beiden anderen Kurven kleine Fluktuationen zu beobachten sind. Diese Schwankungen sind der direkte Ausdruck der Nichtlinearität der TDHF-Gleichungen. Deut-

lich zu erkennen ist jedoch, daß diese Fluktuationen in dem vorliegenden Fall, im Gegensatz zu entsprechenden Ergebnissen in der Kernphysik, wo die Schwankungen in der Größenordnung der Wahrscheinlichkeiten liegen, so gering sind, daß es gerechtfertigt erscheint aus diesen Transferwahrscheinlichkeiten Wirkungsquerschnitte auszurechnen. Bild 4 zeigt einen Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Übergangswahrscheinlichkeiten für Ein- und Zweielektroneneinfang. Die Kurve für den Einelektroneneinfang oszilliert doppelt so häufig wie die Kurve für den Zweielektroneneinfang, das Maximum liegt jedoch bei .5. In beiden Kurven sind die bereits erwähnten Fluktuationen zu beobachten. Der leichte Abfall in den Übergangswahrscheinlichkeiten ist durch die schlechtere Darstellung der Wellenfunktion durch die Zweizentrenbasis bei großen internuklearen Abständen zu erklären. Die Größenordnung dieser Fluktuationen im asymptotischen Bereich - für einen internuklearen Abstand von 10 bis 12 atomaren Einheiten - zeige ich in Bild 5. Selbst bei dieser stark gespreizten Skala sind die Fluktuationen klein im Vergleich zur Übergangswahrscheinlichkeit.

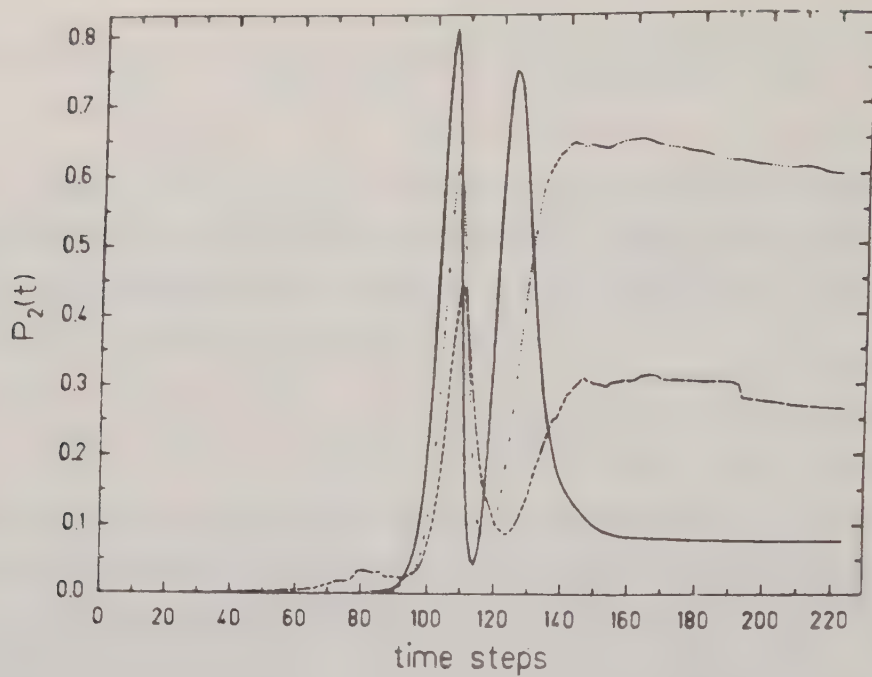


Bild 3: $P_{20}(t)$, — ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung, --- direkter T
 direkter Term + Austauschterm

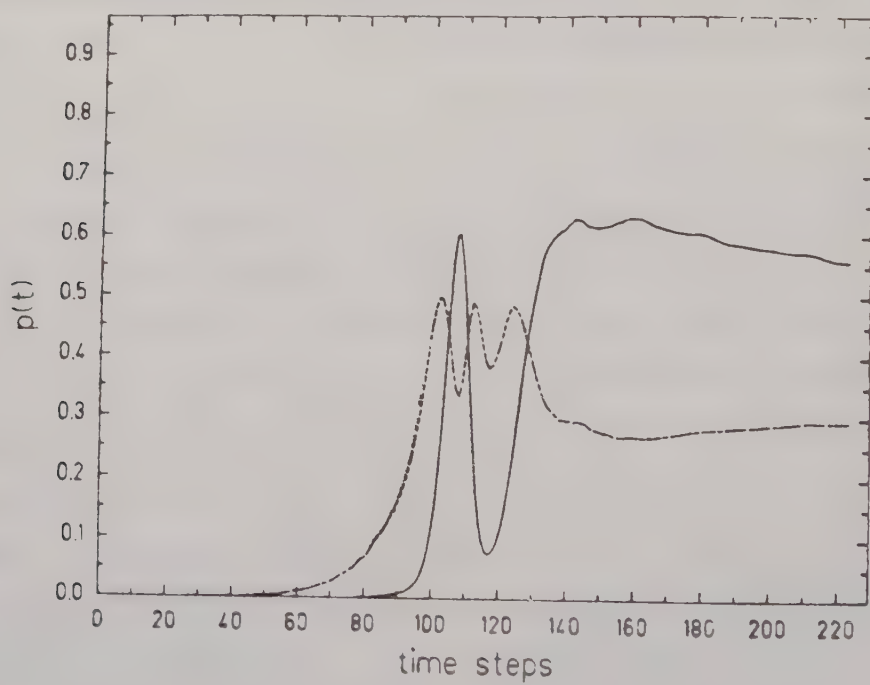


Bild 4: --- $P_{11}(t)$, — $P_{20}(t)$

FLuktuationen in $P_{20}(t)$ 5 keV $b=.8$

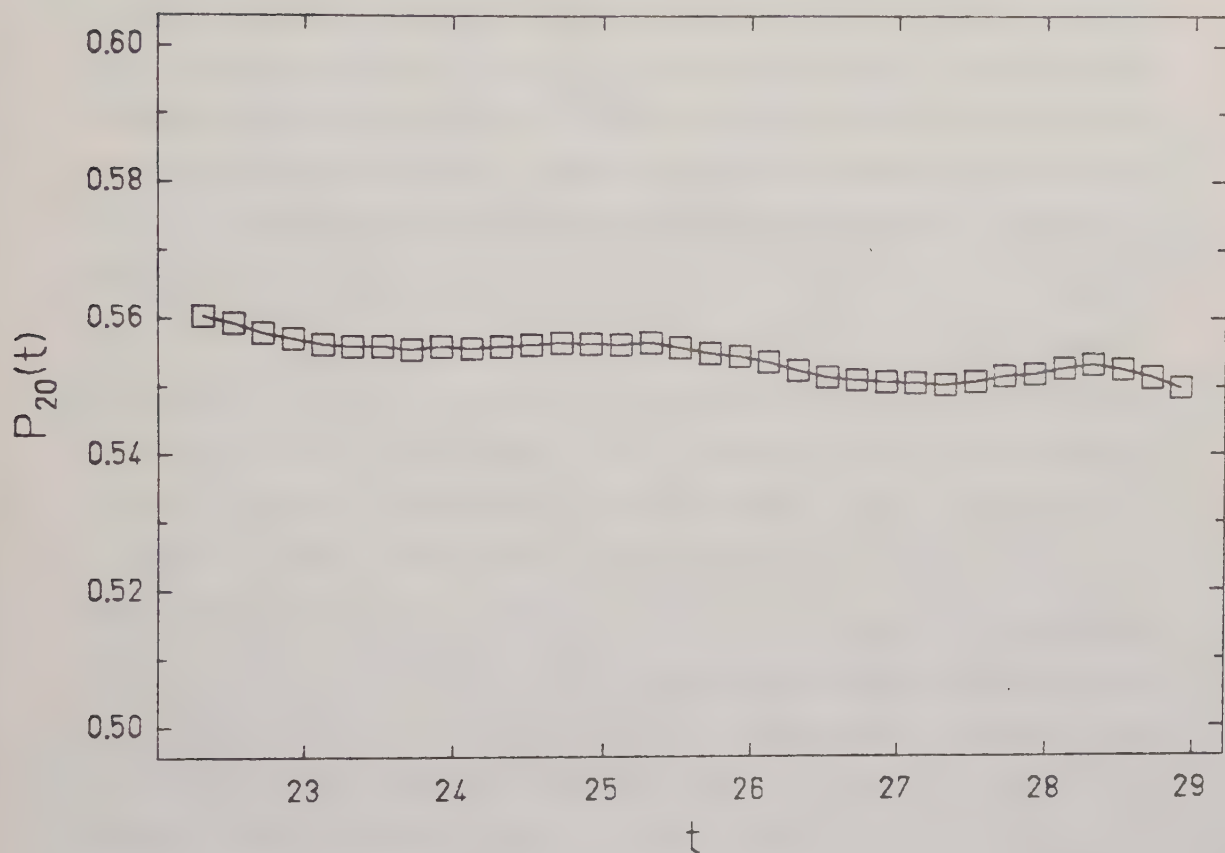


Bild 5: Fluktuationen in der Zweielektronen Einfangswahrscheinlichkeit für große Zeiten

5.2.3 P(b) Kurven

Um Wirkungsquerschnitte für bestimmte Reaktionen angeben zu können benötigt man den Verlauf der Transferwahrscheinlichkeiten für mehrere Stoßparameter. Wegen der resonanten Struktur dieser P(b) Kurven im Falle eines $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$ -Stoßes hat man sehr viele Stoßparameter zu berücksichtigen, um die Struktur der Kurven aufzulösen. Bei einem Vergleich mit anderen Rechnungen sind P(b) Kurven ein weit sensitiveres Kriterium als zum Beispiel so pauschale Größen wie Wirkungsquerschnitte. In Bild 6 vergleiche ich die Übergangswahrscheinlichkeiten bei einer Einschußenergie von 12.5 keV / Nukleon mit Rechnungen von Sandhya Devi und Garcia. Die Struktur der beiden Kurven ist die selbe, Maxima und Minima liegen an derselben Stelle. Das läßt schon erkennen, daß auch die Wirkungsquerschnitte in der gleichen Größenordnung liegen werden. In den folgenden Bildern (7a,7b) zeige ich b P(b) Kurven für den Einelektroneneinfang und den Zweielektroneneinfang. Dabei ist wieder der Einfluß der verschiedenen Arten der berücksichtigten Elektron-Elektron Wechselwirkung zu erkennen. Die durchgezogene Linie steht für den Fall ohne jede Elektron-Elektron Wechselwirkung, die gestrichelte für den Fall mit dem direkten Term und die gepunktete Linie steht für den Fall der vollen Einbeziehung der Elektron-Elektron Wechselwirkung in die TDHF-Gleichungen. Schon am unterschiedlichen Verlauf der Übergangswahrscheinlichkeiten kann man erkennen, daß sich die daraus resultierenden Wirkungsquerschnitte drastisch unterscheiden werden. Die Kurven sind für eine Einschußenergie von 5 keV / Nukleon berechnet worden. Deutlich zu erkennen ist die doppelt so häufige Oszillation für den Einelektroneneinfang. Diese Ergebnisse entstammen Rechnungen, die unter der Annahme einer geraden Bahn für die Nukleonen durchgeführt wurden. Die Verwendung eines Coulomb- bzw eines Moliere-Potentials verändert den Verlauf nur für sehr kleine Stoßparameter, während die Kurven für unterschiedliche Bahnen bei Impactparametern größer 1 a.u. nur innerhalb der Strichdicke

variieren. Das bedeutet, daß man für die Berechnung von totalen Wirkungsquerschnitten, bei der die Transferwahrscheinlichkeiten zusätzlich mit den jeweiligen Stoßparametern gewichtet werden, keinerlei Abhängigkeit von der klassischen Bahn beobachtet. In Bild 8a und 8b sind die Übergangswahrscheinlichkeiten für verschiedene Einschußenergieen aufgetragen. Das letzte Maximum des Zweielektroneneinfangs wandert für höhere Energieen zu kleineren Stoßparametern, d.h. die daraus resultierenden Wirkungsquerschnitte werden kleiner. Weniger deutlich ist die Energieabhängigkeit für den Ein-elektroneneinfang. Hier verschiebt sich das Maximum weniger, dagegen verändert sich die Form.

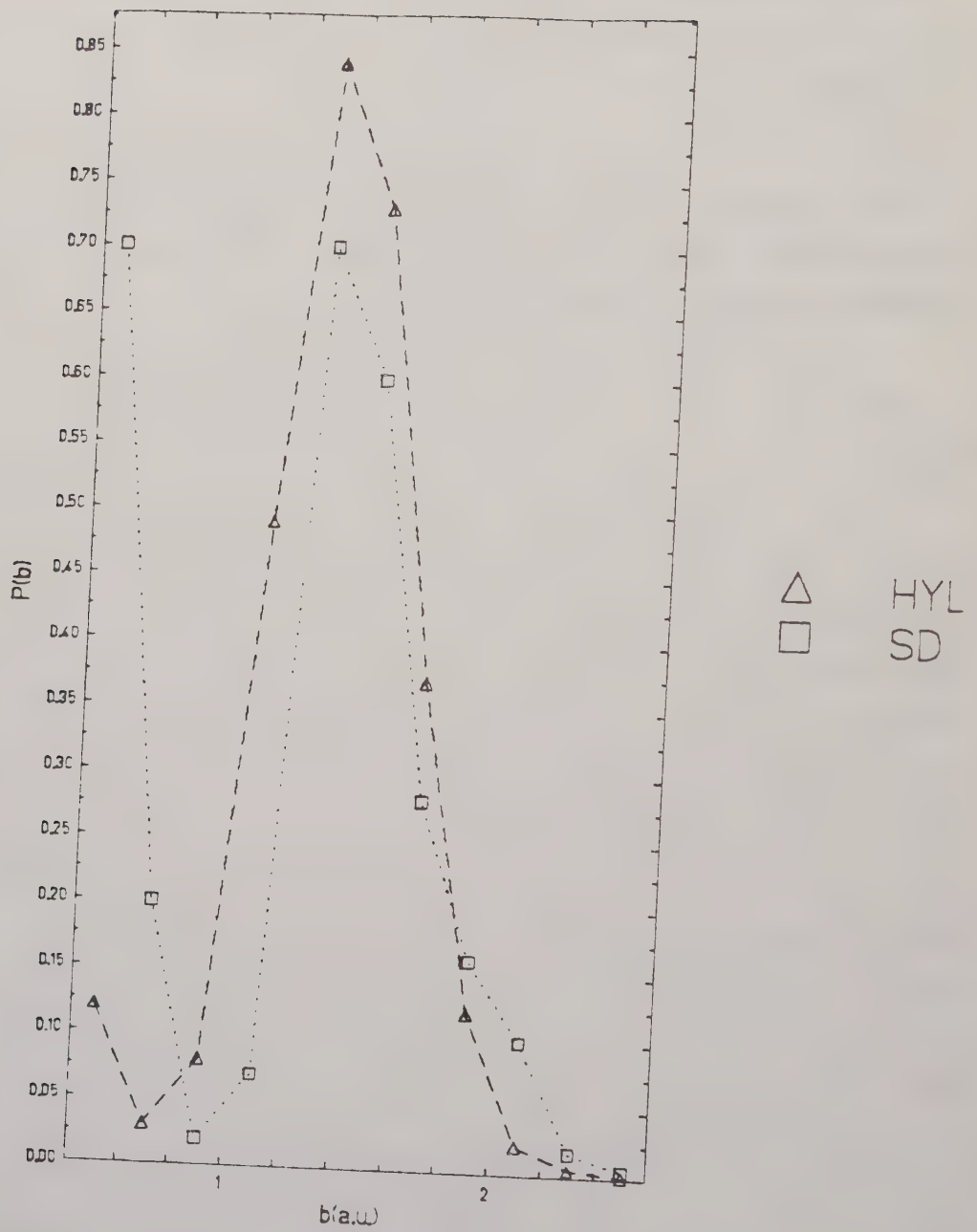


Bild 6: Vergleich von $P_{20}(b)$ mit Rechnungen von Sandhya Devi und Garcia $\text{He}^{++} + \text{He} \rightarrow \text{He} + \text{He}^{++}$, $E = 12.5 \text{ keV/a.u.}$

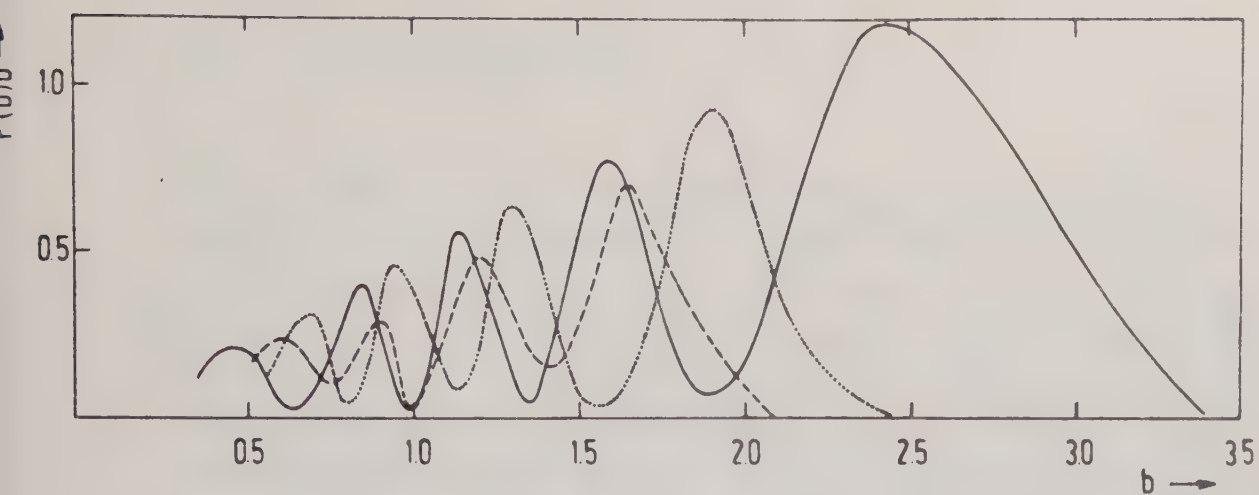


Bild 7a: $bP_{11}(b)$ 5 keV/Nukleon — ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung,
 --- direkter Term, ---- direkter Term + Austauschterm

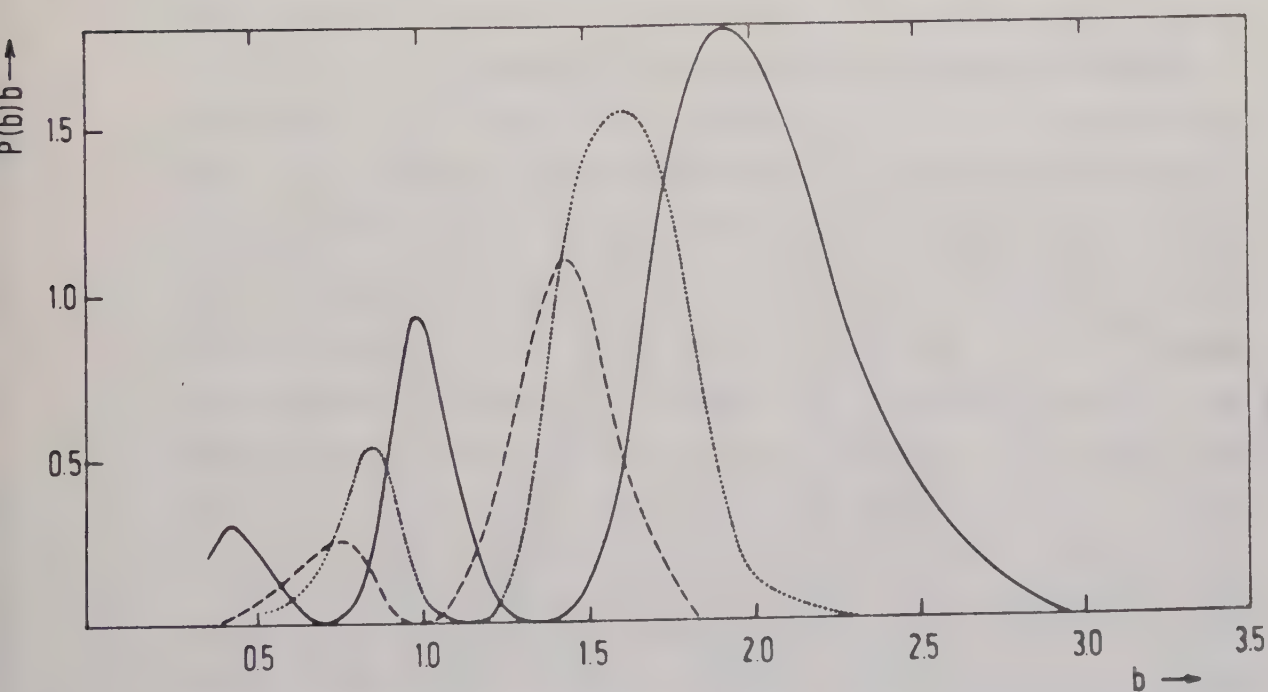


Bild 7b: $bP_{20}(b)$ 5 keV/Nukleon — ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung,
 --- direkter Term, ---- direkter Term + Austauschterm

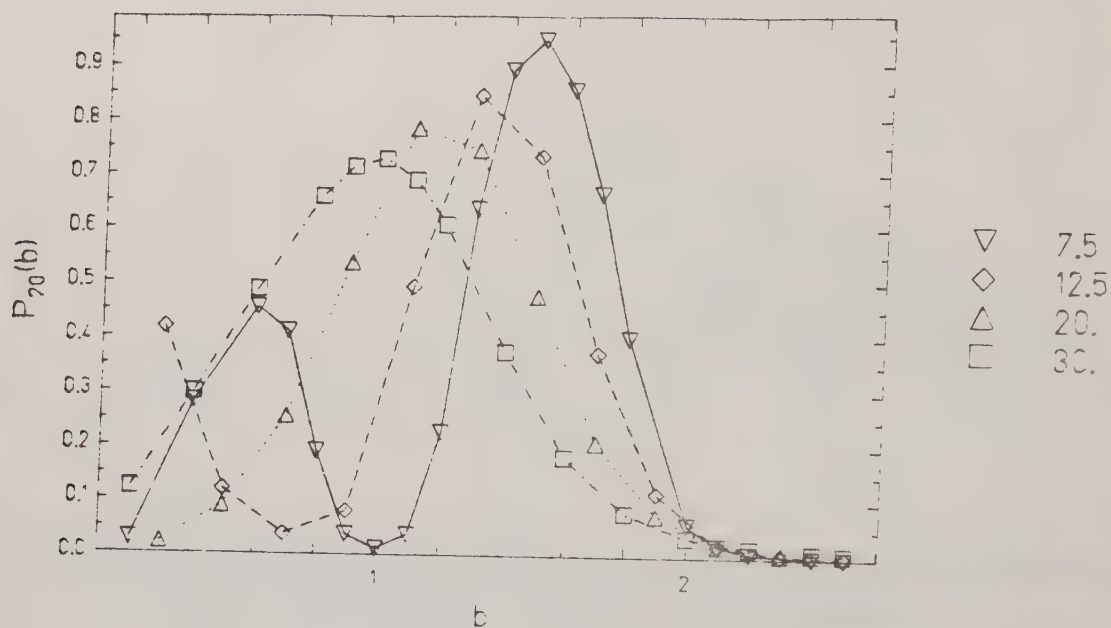


Bild 8a: $P_{20}(b)$ für verschiedene Einschußenergieen

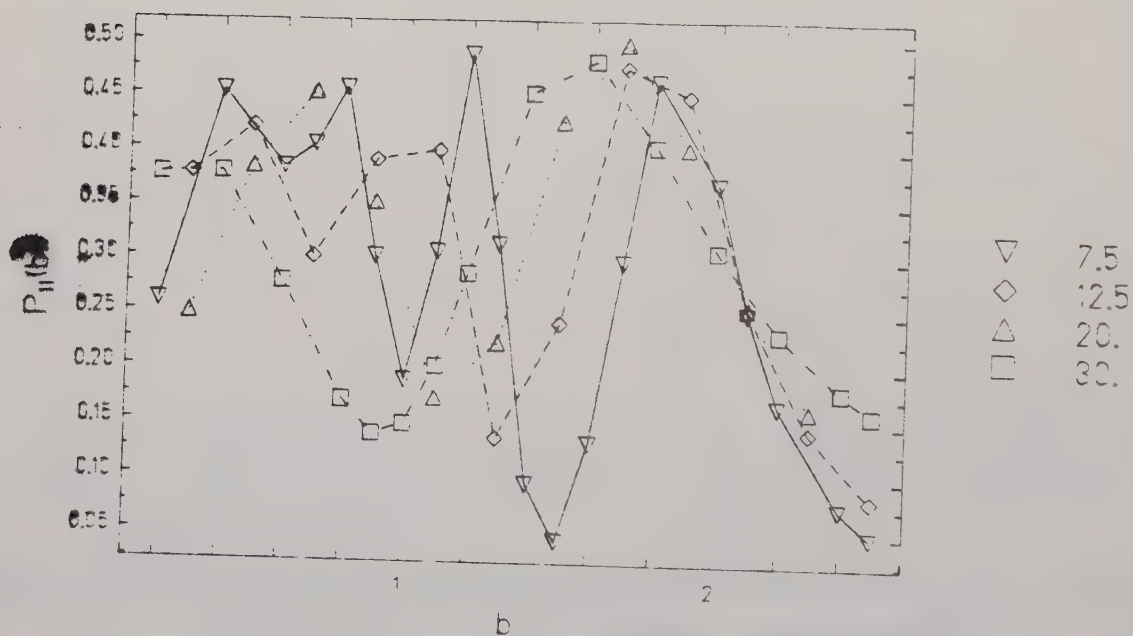


Bild 8b: $P_{11}(b)$ für verschiedene Einschußenergieen

5.2.4 Wirkungsquerschnitte

Der Vergleich der mit diesen Rechnungen erhaltenen Wirkungsquerschnitte mit den Ergebnissen von Sandhya Devi und Garcia, sowie Harel und Salin, und den Messungen von Afrosimov et al. und Berkner et al. zeigt gute Übereinstimmung für den Zweielektroneneinfang (Bild 9). Auch beim Einelektroneneinfang (Bild 10) liegen meine Ergebnisse für hohe Energien bei den Werten, die von den Experimentatoren gemessen und von den Theoretikern berechnet wurden. Für kleine Einschußenergien jedoch ergibt sich eine deutliche Diskrepanz zwischen den experimentell bestimmten Wirkungsquerschnitten und den Ergebnissen von Harel und Salin auf der einen, sowie den Werten von Sandhya Devi und Garcia und meinen auf der anderen Seite. Nicht nur der absolute Wert für den Einelektroneneinfangswirkungsquerschnitt liegt um einen Faktor zwei zu hoch, auch der Einfang in die speziellen Kanäle wird falsch beschrieben. Afrosimov et al. stellten fest, daß in diesem Energiebereich der Einfang in angeregte Zustände mit über 90% der dominierende Prozeß ist, Harel und Salin erhalten dies auch aus ihren Rechnungen, während bei meinen Rechnungen, und auch bei denen von Sandhya Devi und Garcia, der Einfang in den Grundzustand vorherrschend ist. Der Wirkungsquerschnitt bei 5 keV / Nukleon Einschußenergie wurde von Sandhya Devi bestätigt [SAN83a]. Die äußerst gute Übereinstimmung zwischen meinen Rechnungen und denen von Sandhya Devi und Garcia läßt den Schluß zu, daß die Ursache in dieser Diskrepanz nicht in einem Fehler in meinen Rechnungen zu suchen ist, sondern in der Methode. Sandhya Devi und Garcia lösen die gleichen TDHF-Gleichungen wie ich, der Unterschied liegt in der Tatsache, daß sie die Gleichungen in einer Koordinatendarstellung auf einem Gitter lösen. Es zeigt sich, daß dieses Verfahren äquivalent ist zur Entwicklung nach Basisfunktionen, die Schwierigkeiten, die sich aus Größe und Umfang der Basis ergeben, werden hier auf die Zahl und Abstand der Gitterpunkte verlagert. Die Tatsache daß Harel und Salin die experimentellen

Ergebnisse so exzellent reproduzieren legt den Schluß nahe, daß man über TDHF hinausgehen muß und einen Konfigurationsmischungs-Ansatz in die Rechnungen miteinbeziehen muß.

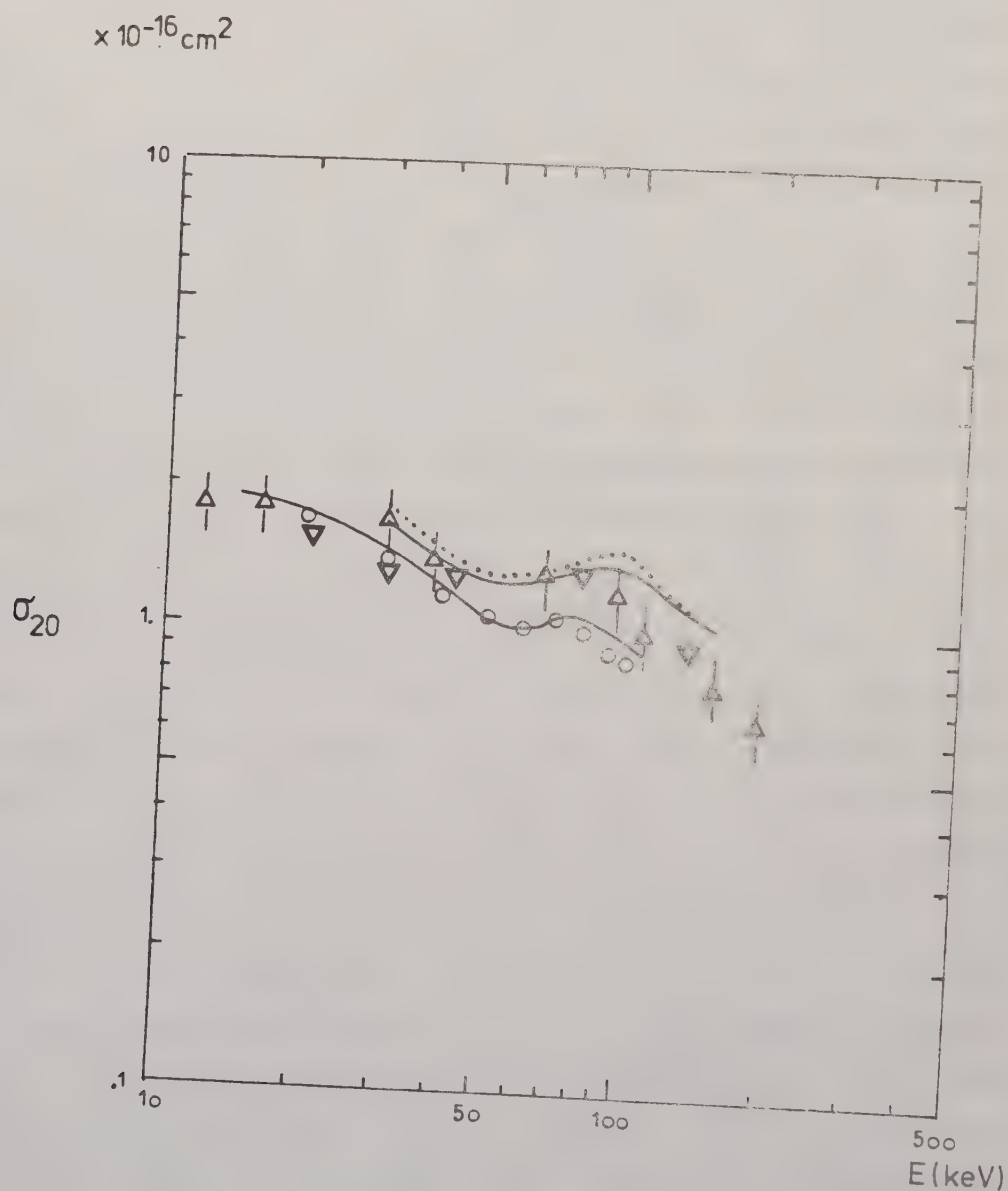


Bild 9: Wirkungsquerschnitte für Zweielektroneneinfang in $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$
 — Harel und Salin, $\circ$ Afrosimov et al., $\triangle$ Berkner et al.,
 --- Sandhya Devi und Garcia, ∇ meine Rechnungen

$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$

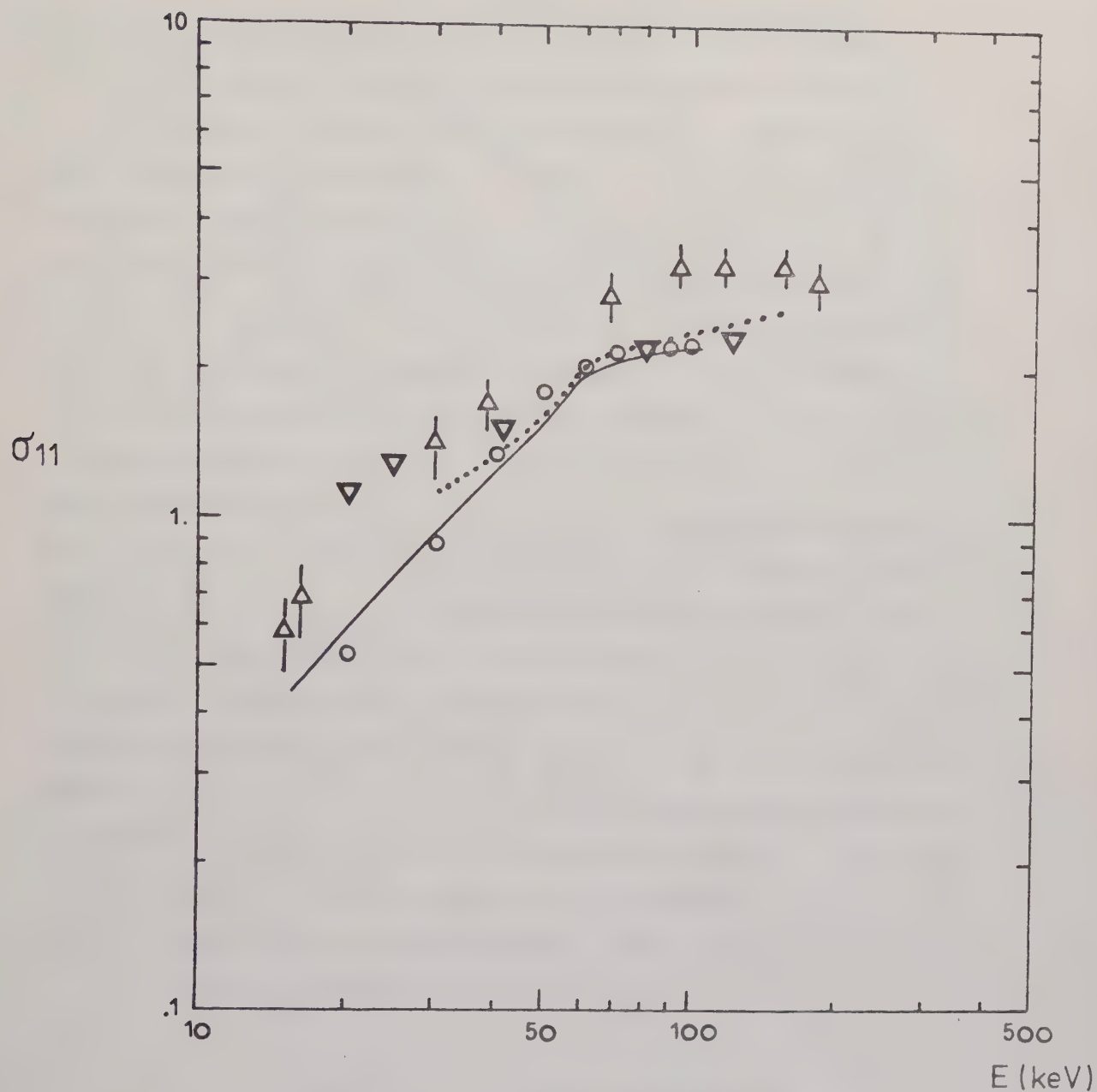


Bild 10: Wirkungsquerschnitte für Einelektroneneinfang in $\text{He}^{++} + \text{He}(^1\text{S})$
 — Harel und Salin, $\circ$ Afrosimov et al., $\triangle$ Berkner et al.,
 ---- Sandhya Devi und Garcia, ∇ meine Rechnungen

5.3 Das System $H^+ + He(1s^2)$

Als erstes heteronukleares Stoßsystem untersuchte ich das System $H^+ + He(1s^2)$. Für dieses Streusystem gibt es keinen Resonanzkanal, die Übergangswahrscheinlichkeiten sind eine glatte Funktion des Stoßparameters, d.h. man kann die $P(b)$ -Kurven aus relativ wenigen Punkten rekonstruieren. Da der dominierende Kanal der Einfang eines Elektrons in den $1s$ Zustand des Wasserstoffs ist, machen sich die im vorherigen Kapitel diskutierten Mängel in meinen Rechnungen für pauschale Aussagen nicht so bemerkbar. Der Versuch Alignment-Messungen von Hippler et al. [HIP83] zu berechnen scheiterte an der zu schwachen Besetzung der hierfür benötigten Kanäle. In Bild 11 zeige ich die $P(b)$ -Kurven für den Eielektroneneinfang für verschiedene Energien. Die daraus resultierenden Wirkungsquerschnitte werden in Bild 13 mit experimentellen Daten [STI56, HEE66, BAR58], sowie UDWA-Rechnungen von Suzuki et al [SUZ84] verglichen. In einem Energiebereich von 10 - 40 keV zeigen meine Ergebnisse gute Übereinstimmung mit den Vergleichsdaten, sowohl die Form der Kurve als auch die absoluten Zahlenwerte werden durch die TDHF-Rechnungen gut wiedergegeben. Für Rechnungen mit sehr hoher Einschußenergie zeigen die Übergangswahrscheinlichkeiten als Funktion des Stoßparameters ein seltsames Verhalten. Anstatt für große Impactparameter abzufallen steigen sie wieder an. Dieses unphysikalische Verhalten liegt darin begründet, daß man zur Darstellung der bewegten atomaren Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms über zuwenig Basisfunktionen verfügt, um die schnell oszillierende Translationsphase darstellen zu können.

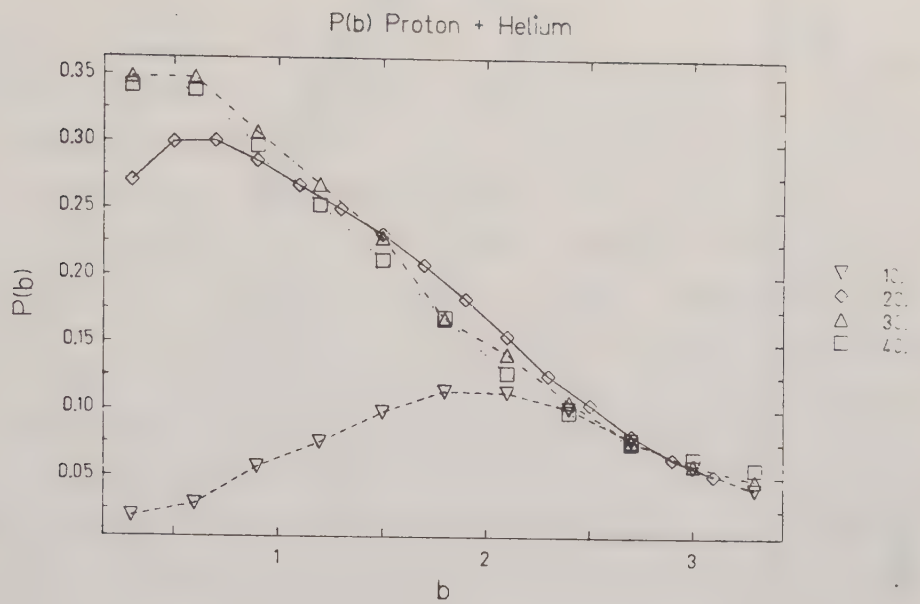


Bild 11: $P_{11}(b)$ für verschiedenen Energien in $H^+ + He(1s^2)$

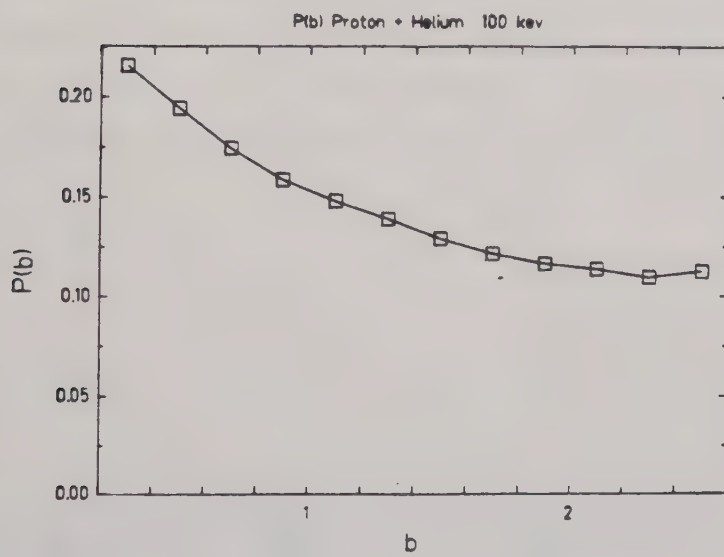


Bild 12: $P_{11}(b)$ für 100 keV Einschußenergie

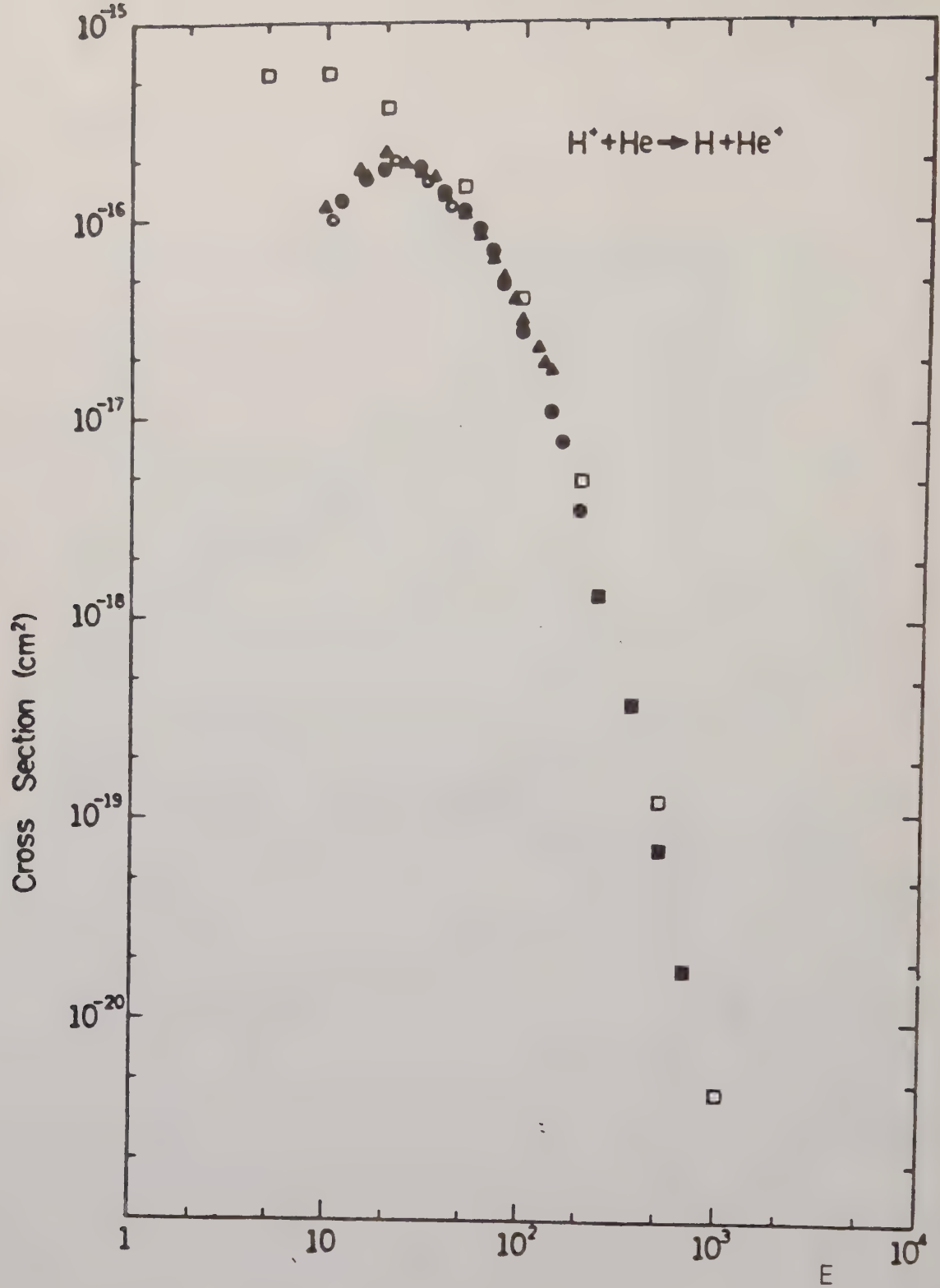


Bild 13: Wirkungsquerschnitte für Einelektroneneinfang in den Wasserstoff ● STI56, ▼ WEL67, ▲ HEE66, ■ BAR58, □ SUZ84, ○ meine Rechnungen

5.4 Das System $\text{Li}^{3+} + \text{He}(1s^2)$

Als letztes Stoßsystem dieser Art untersuchte ich das System $\text{Li}^{3+} + \text{He}(1s^2)$. Wegen des starken Coulombpotentials des dreifach positiv geladenen Lithiumatoms mußten die Rechnungen bei einem größeren internuklearen Abstand begonnen werden, um sicherzustellen, daß der Einfluß des Elektron-Nukleon Potentials richtig wiedergegeben wird. Für dieses System liegen Messungen von Wirkner-Bott et al. [WIR81] vor, mit denen ich meine Ergebnisse vergleichen kann, andere Rechnungen existieren für diesen Energiebereich bisher nicht. Die Wirkungsquerschnitte für den Einelektroneneinfang sind um einen Faktor vier größer als im $\text{He}^{2+} + \text{He}(1s^2)$ Fall, das läßt schon erahnen, daß die Hauptbeiträge von sehr großen Stoßparametern kommen. In Bild 14 zeige ich die $P(b)$ -Kurven für Einelektroneneinfang in das Lithiumion für zwei Energien. Da das Maximum in den Übergangswahrscheinlichkeiten bei großen Stoßparametern liegt, und für die Berechnung der Wirkungsquerschnitte eine Wichtung mit b erfolgt, kann man die Beiträge von Stoßparametern kleiner als 1 a.u. vernachlässigen. In den Wirkungsquerschnitten zeigen die Ergebnisse gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

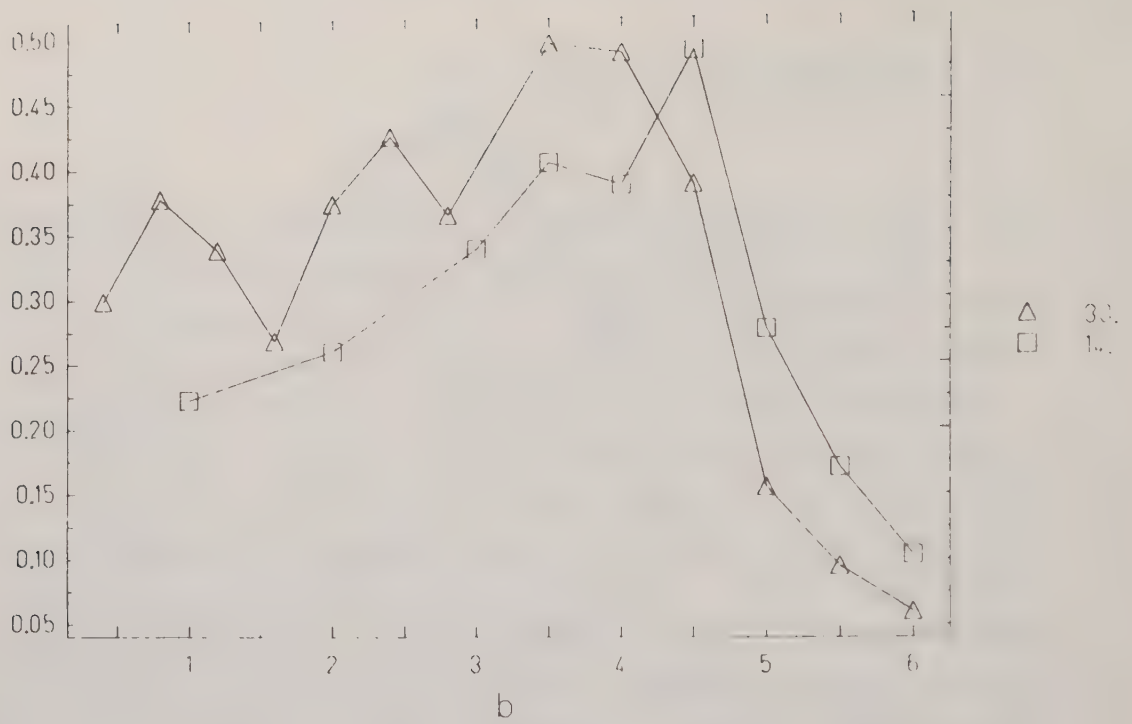


Bild 14: $P(b)$ für Einelektroneneinfang bei 14 keV und 30 keV

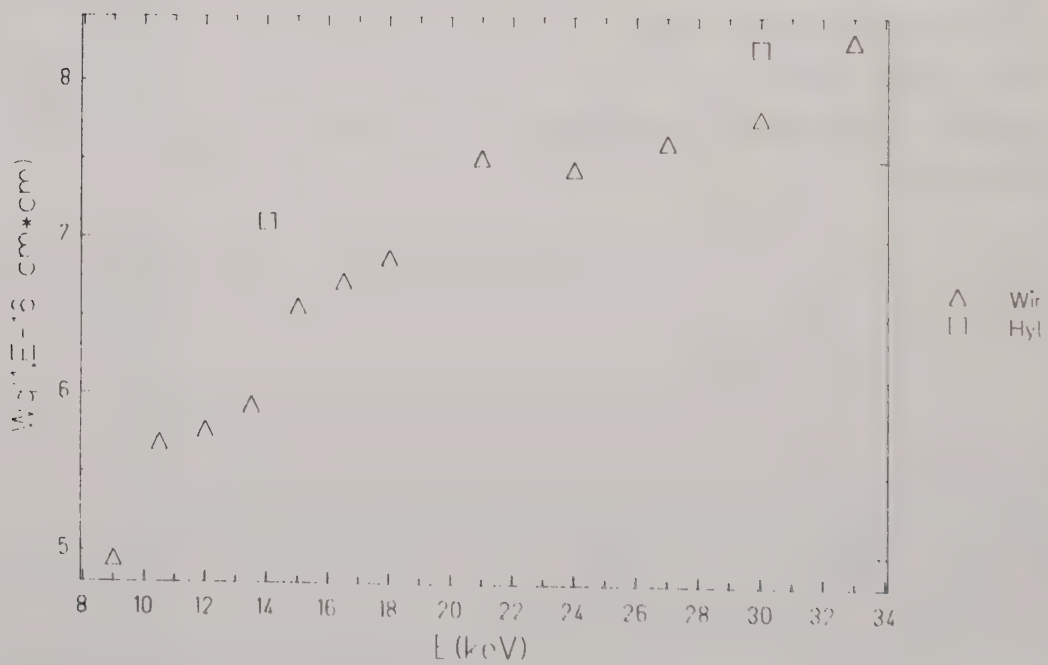
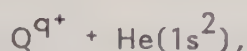


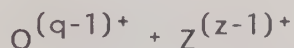
Bild 15: Wirkungsquerschnitte für Einelektroneneinfang in $\text{Li}^{3+} + \text{He}(1s^2)$ im Vergleich mit WIR81

6 Ergebnisse fuer Rechnungen mit beliebiger Anfangsverteilung der Elektronen

Alle bisher betrachteten Stoßsysteme waren von der Art



ein nackter Kern wurde auf ein Heliumtarget im Grundzustand geschossen. Für Systeme dieser Art war die volle Elektron-Elektron Wechselwirkung, wegen der Spinartung, gerade durch $1/2$ mal dem direkten Term gegeben. Um den Einfluß des komplexen Austauschpotentials beobachten zu können, mußten auch Rechnungen für Systeme der Art



durchgeführt werden. Als Testsystem wählte ich das symmetrische Stoßsystem $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$. Diese Rechnungen wurden sowohl für einen Spintriplett-, als auch für einen Spinsingulett- Zustand, durchgeführt. In Bild 16 und 17 zeige ich die Elektronendichte für verschiedenen Zeitschritte. Der Unterschied in den Ergebnissen der beiden Rechnungen scheint nur gering, solange man nur die Konturlinien betrachtet. Weit deutlicher werden die Unterschiede bei der Betrachtung der 3-D-Zeichnungen. Während die Elektronen, sich für den Tripletfall auf molekülähnlichen Orbitalen bewegen sammelt sich die meiste Dichte im Singulettfall zwischen den beiden Kernen. Es hat den Anschein, als ob für den Singulettfall bindende Molekülorbitale ausgebildet würden, während im Falle eines Triplet Zustandes antibindende Orbitale vorherrschend wären. Für größere internukleare Abstände verlieren sich diese Unterschiede jedoch, das ist darauf zurückzuführen, daß der Stoßparameter für diese Rechnungen mit 1.5 a.u. sehr groß gewählt wurde, und der Einfluß der Elektron-Elektron Wechselwirkung deshalb klein war. Dennoch beobachtet man hierbei einige interessante Vorgänge: Bei noch rela-

tiv großen internuklearen Abständen werden die beiden Ionen polarisiert. Im weiteren Verlauf des Stoßes lösen sich Teile der Elektronendichte aus der Elektronenwolke, was man als Einsetzen von Ionisation interpretieren kann. Die abseparierten Teile werden bei größeren Abstände allerdings wieder eingefangen. Die Zweizentrenbasis ist nicht in der Lage Dichten zu beschreiben, die sich unabhängig vom jeweiligen Zentrum bewegen.

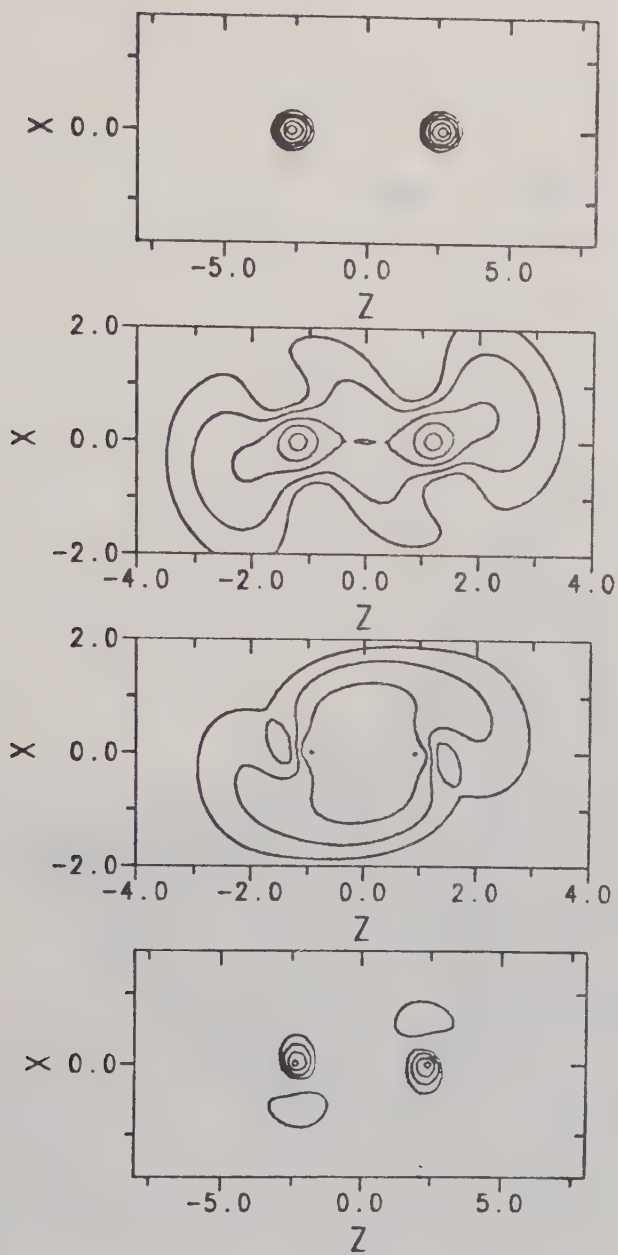


Bild 16: Entwicklung der Elektronendichte für einen $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$ Stoß mit antiparalleler Spinorientierung

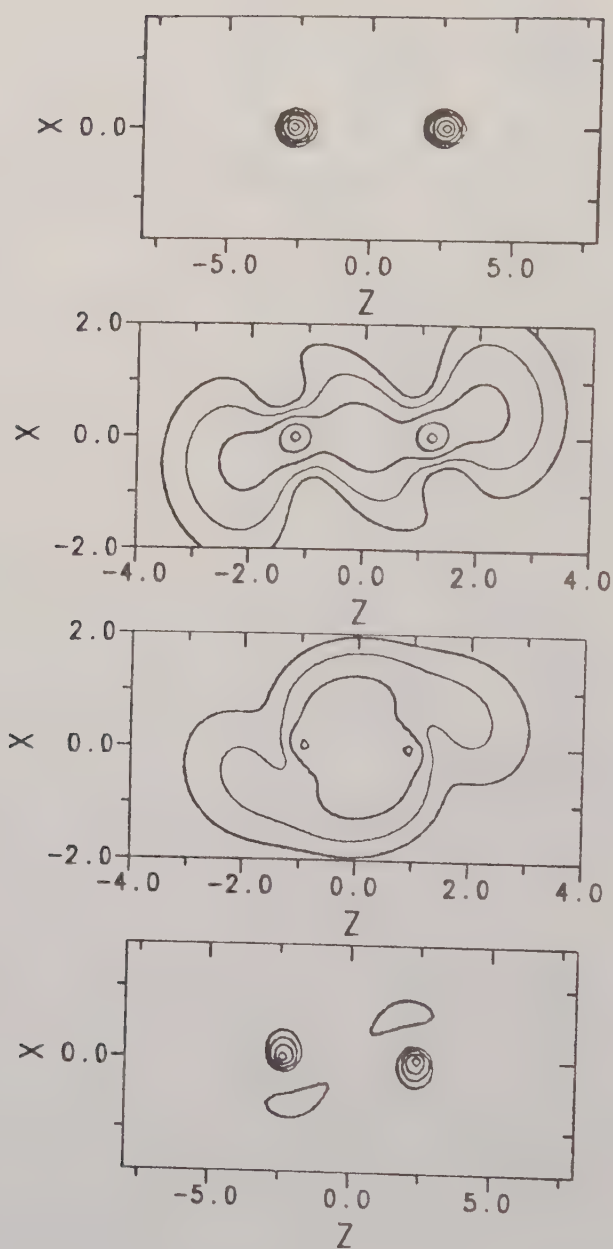


Bild 17: Entwicklung der Elektronendichte für einen $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$ Stoß mit paralleler Spinorientierung

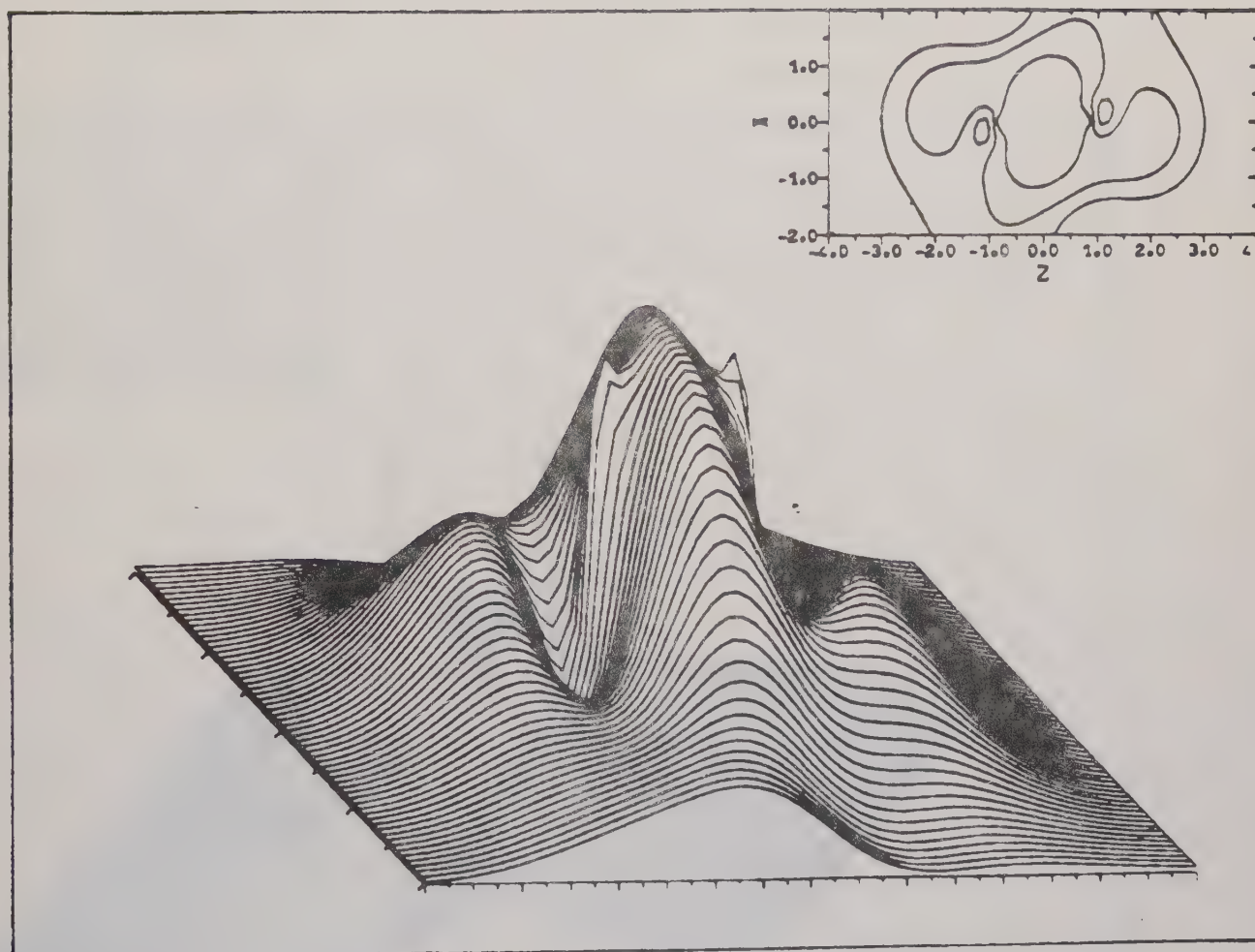


Bild 18: Elektronendichte für $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$ Singulett

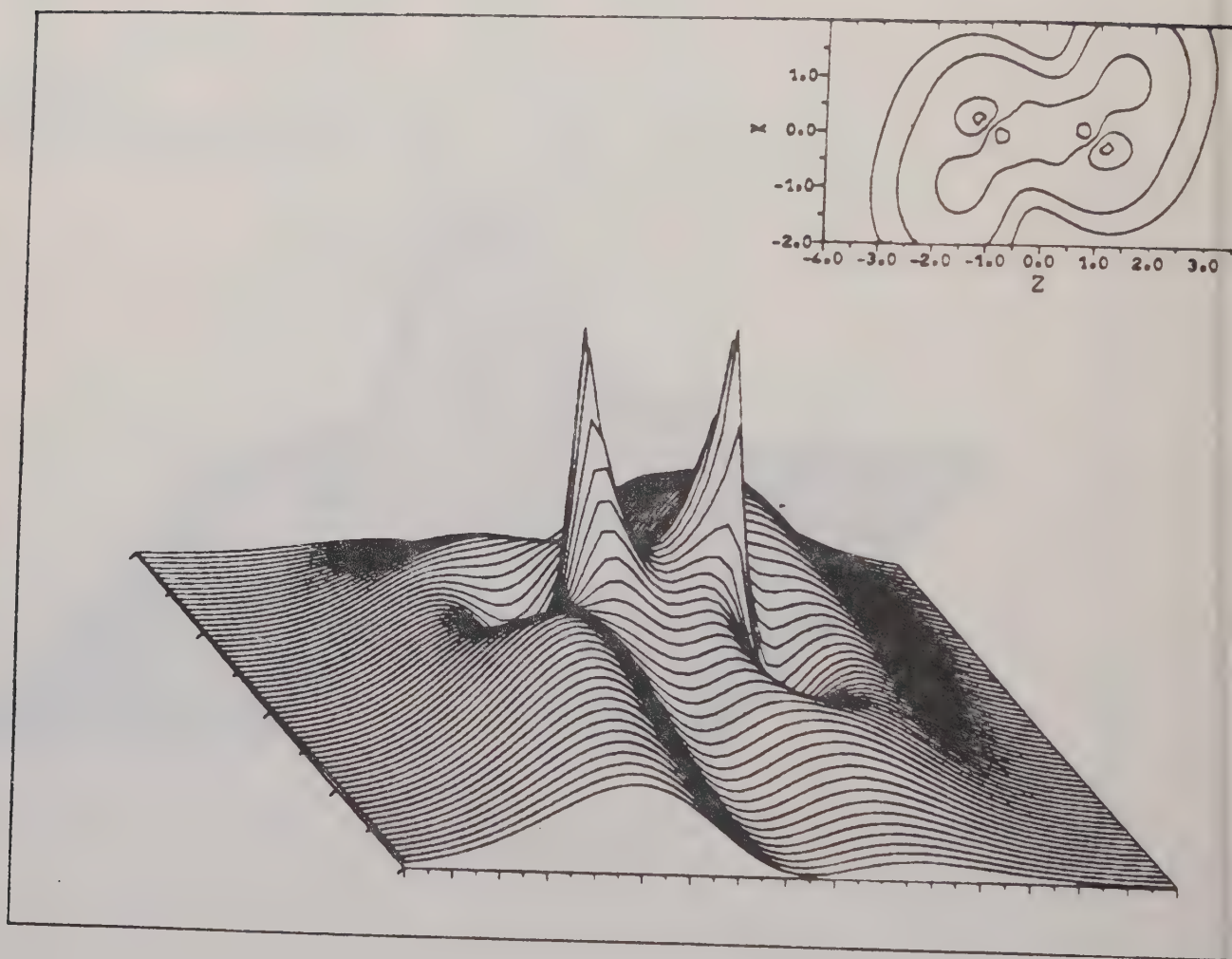


Bild 19: Elektronendichte für $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$ Triplet

Um den Unterschied zwischen Rechnungen mit einem Singulett und einem Triplettzustand deutlicher zu machen, untersuchte ich das System $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$. Für dieses System ist bei antiparalleler Spinorientierung der Einfang in das 2s Niveau des Heliumatoms eine Resonanzreaktion, während bei paralleler Spinorientierung dieser Einfang blockiert sein müßte. Die Ergebnisse für einen Stoß mit dem Impactparameter von 1.5 a.u. zeigen jedoch keinerlei resonante Struktur. Der Unterschied zwischen den Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung des komplexen Austauschpotentials ist gering, weil bei einem geringstem Abstand der beiden Zentren von 1.5 a.u. das Austauschpotential nicht nennenswert wirkt. Deutlicher als im vorher diskutierten Fall ist jedoch das Ablösen von Elektronendichte zu beobachten.

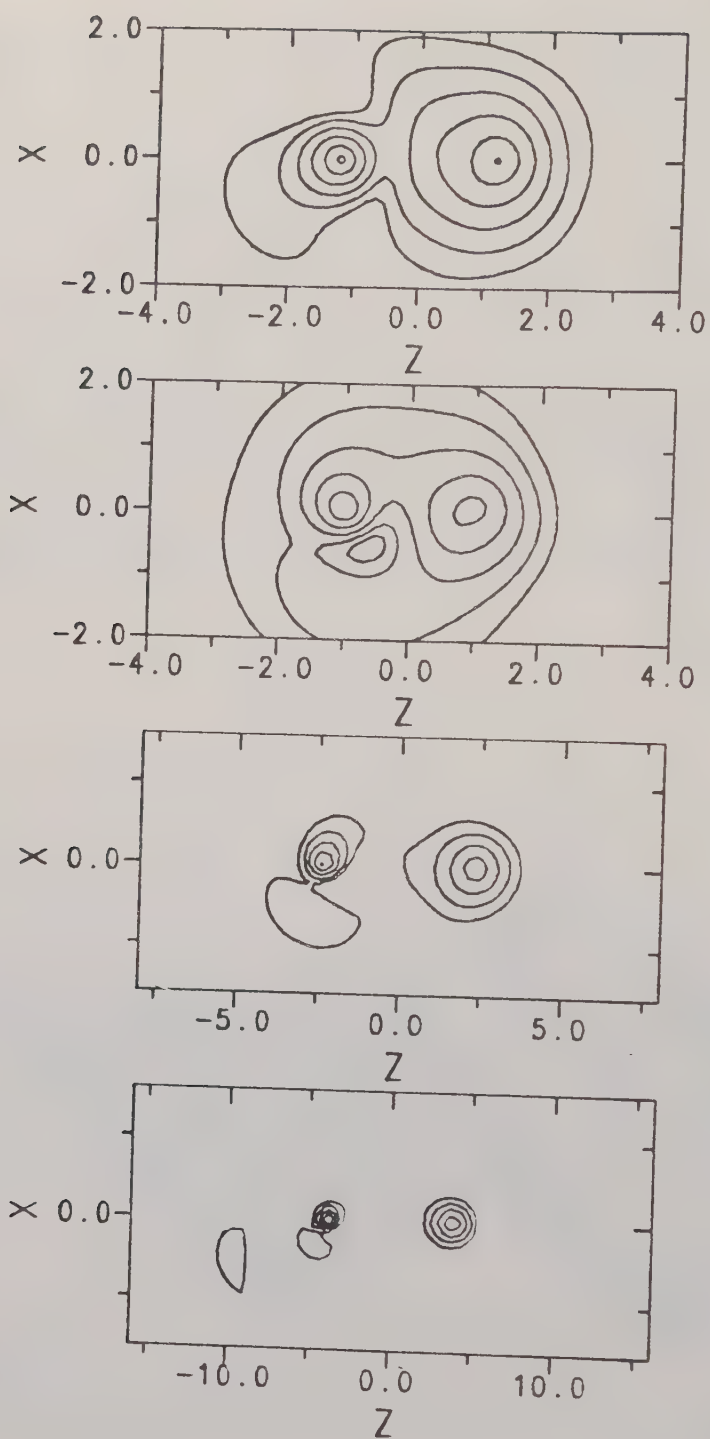


Bild 20: Entwicklung der Elektronendichte im $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ Stoß Singulett

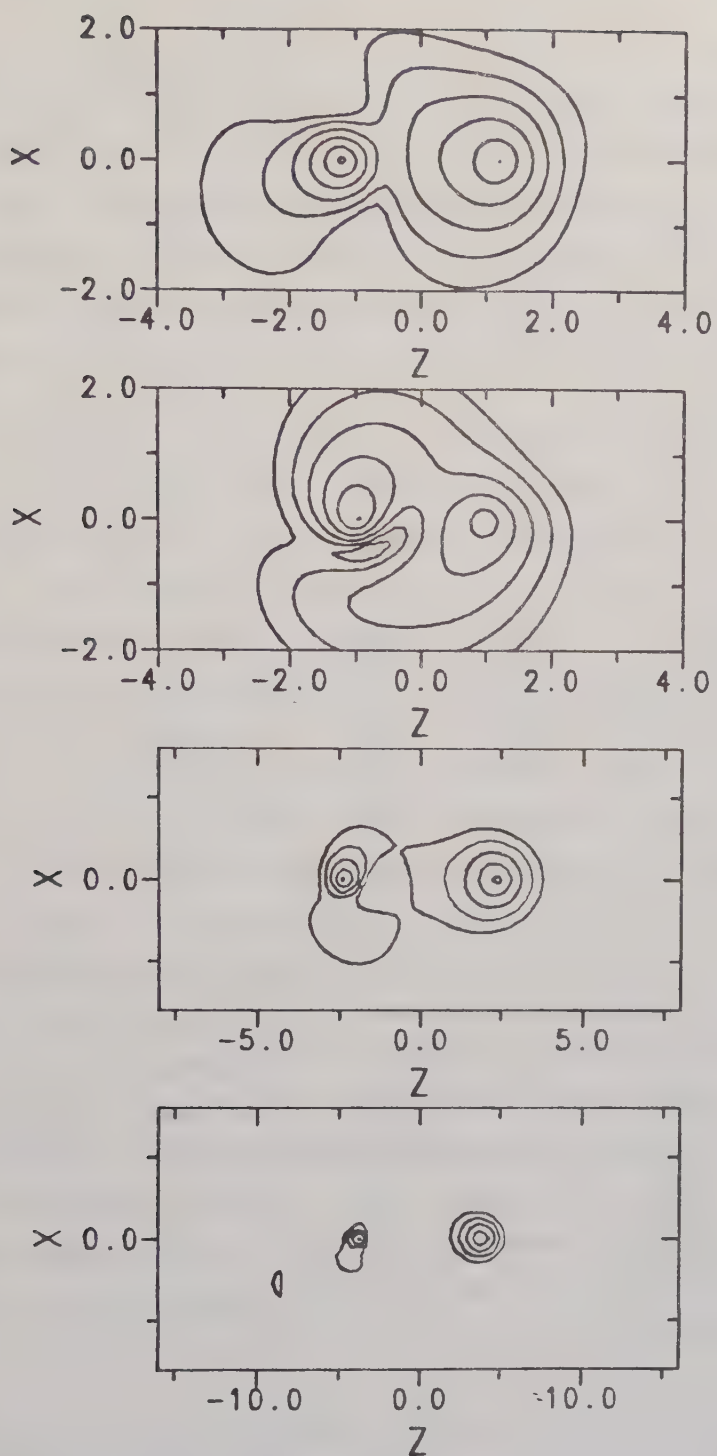


Bild 21: Entwicklung der Elektronendichte im $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ Stoß Triplet

Um den Unterschied für die verschiedenen Austauschpotentiale deutlicher zu sehen, führte ich die gleichen Rechnungen für einen kleineren Stoßparameter (.5) durch. Zusätzlich vergleiche ich die Ergebnisse mit einer Rechnung ohne jede Berücksichtigung der Elektron-Elektron Wechselwirkung. Für den Fall ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung (Bild 22) beobachtet man bis zum Erreichen des Minimalabstandes die Ausbildung von quasimolekularen Zwischenzuständen, die im weiteren Ablauf in ausgeschmiert werden, was gerade einer Anregung entspricht. In geringem Umfang kann eine Oszillation der Dichte zwischen dem Helium- und dem Wasserstoff-Kern beobachtet werden. Bild 23 zeigt den Fall mit einem Singulettzustand. Im einlaufenden Bereich zeigt sich das gleiche Verhalten wie im Fall ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung. Auch hier geht bei der Separation ein großer Teil der Elektronendichte verloren, man beobachtet aber keinerlei Oszillationen. Ein ganz anderes Verhalten beobachtet man für den dritten Fall, der Rechnung mit einem Spintriplett Zustand. Auch hier bilden sich im einlaufenden Bereich quasimolekulare Zwischenzustände aus, das Maximum der Dichte verbleibt aber immer bei den beiden Zentren. Trotz heftiger Reaktionen, bei kleinen internuklearen Abständen, trennen sich die beiden Stoßpartner sauber, und es bilden sich wieder atomare Zustände aus. Der Verlust in der Dichte ist hier weit geringer als in den beiden vorher geschilderten Fällen. Die Ursache für dieses unerwartete Verhalten könnte in der Stärke des Elektron-Elektron Potentials liegen, für eine genauere Analyse müßte man das Korrelationsdiagramm für dieses Stoßsystem betrachten. Mit den in Kapitel 4 diskutierten Auswertmethoden ergeben sich folgende Resultate:

a) inklusive Auswertung: Für $t \rightarrow -\infty$ beträgt die Wahrscheinlichkeit dafür, genau ein Elektron im 2s Zustand des Heliums zu finden 99.94%, d.h. der Anfangszustand ist in der Zweizentrenbasis gut dargestellt.

Für $t \rightarrow \infty$ ergibt sich für den Singulettfall eine Wahrscheinlichkeit von 41.5%, und für den Triplettfall von 59.1%.

b) deutlicher werden die Unterschiede bei der Kanalanalyse. Projiziert man die Einteilchenorbitale auf Heliumzustände, so hat man anfänglich im ersten Orbital keine Wahrscheinlichkeiten, während man für das zweite Orbital im 2s Zustand über .999 erhält. Führt man die gleichen Projektionen nach dem Stoßprozeß durch, so erhält man:

Zustand	Singulett		Triplett	
	1. Orb.	2. Orb.	1. Orb.	2. Orb.
1s	.0003	.0020	.0001	.0005
2s	.2481	.2871	.0665	.5429
2p ₀	.1365	.0879	.1880	.0063
2p ₁	.0288	.0944	.0407	.0171
3s	.0231	.0426	.0038	.0044
3p ₀	.0337	.0389	.0649	.0146

Für den Singulettfall ist im ersten Orbital ein Übergang von nahezu 25% in das 2s Niveau des Heliums zu beobachten, während dieser Übergang im Triplettfall gerade gesperrt ist. Unabhängig von der Auswertung, die ja das Pauliprinzip explizit enthält, bewirkt auch das Austauschpotential ein Sperren der verbotenen Übergänge.

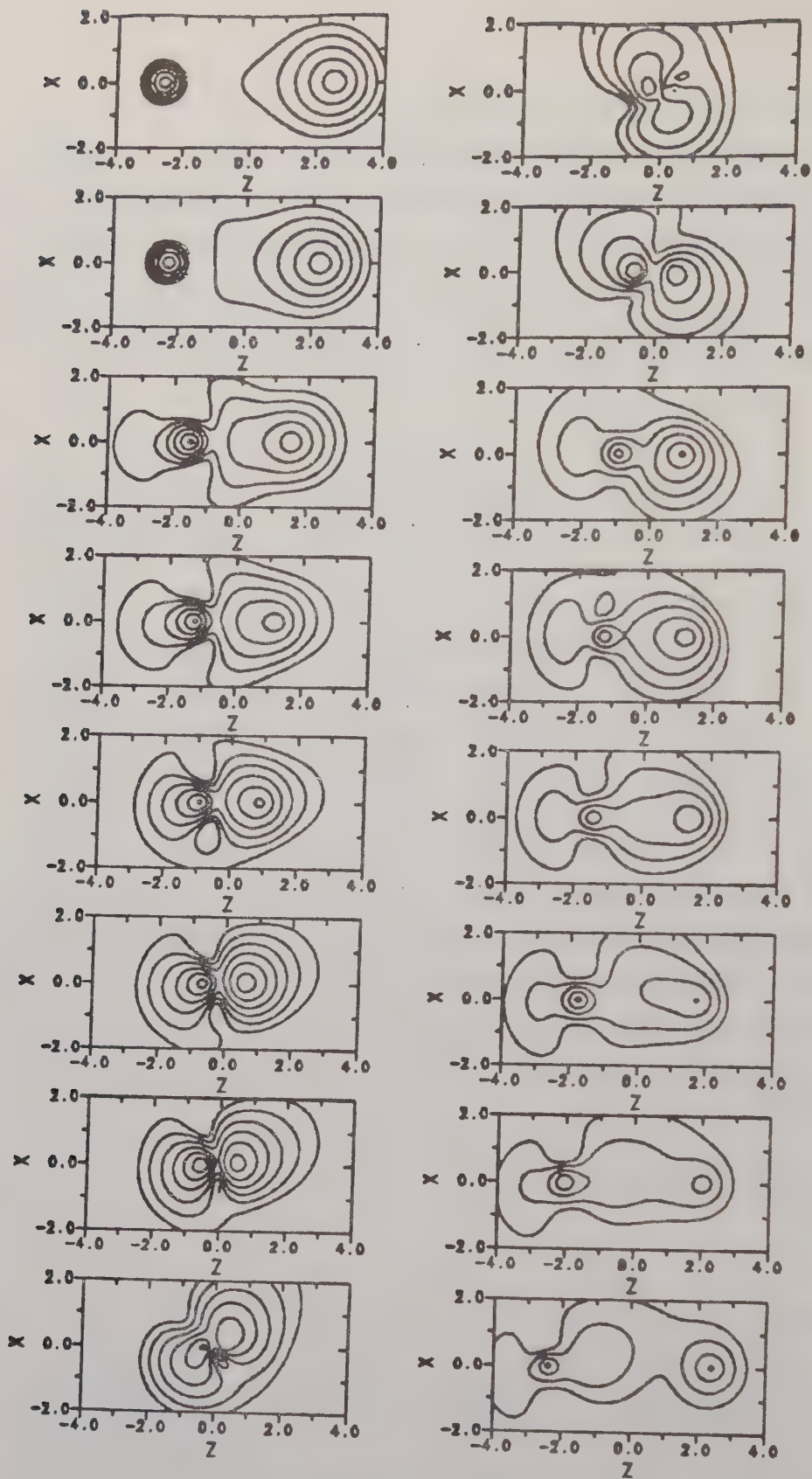


Bild 22: Elektronendichte für $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung

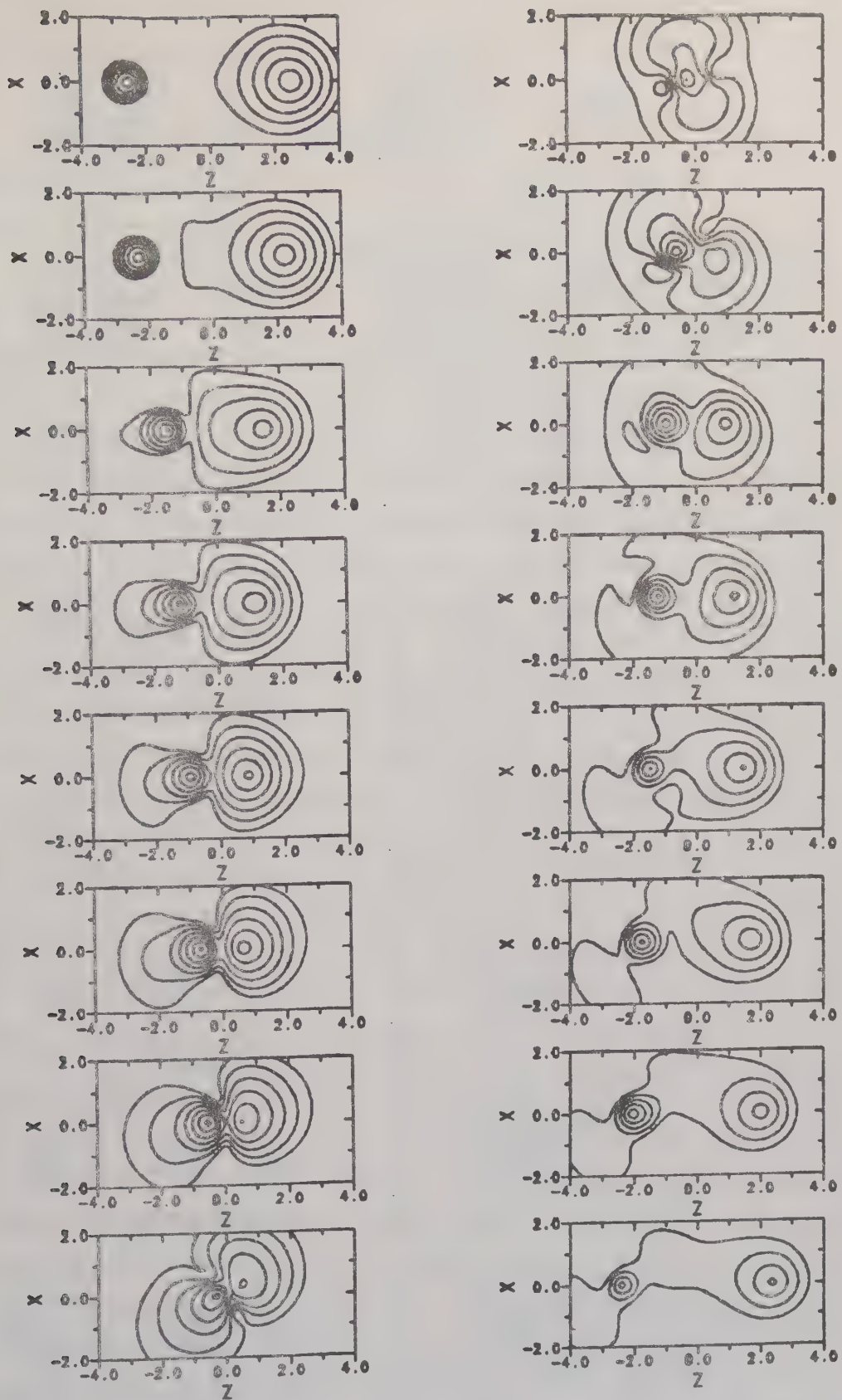


Bild 23: Elektronendichte für $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ Singulett

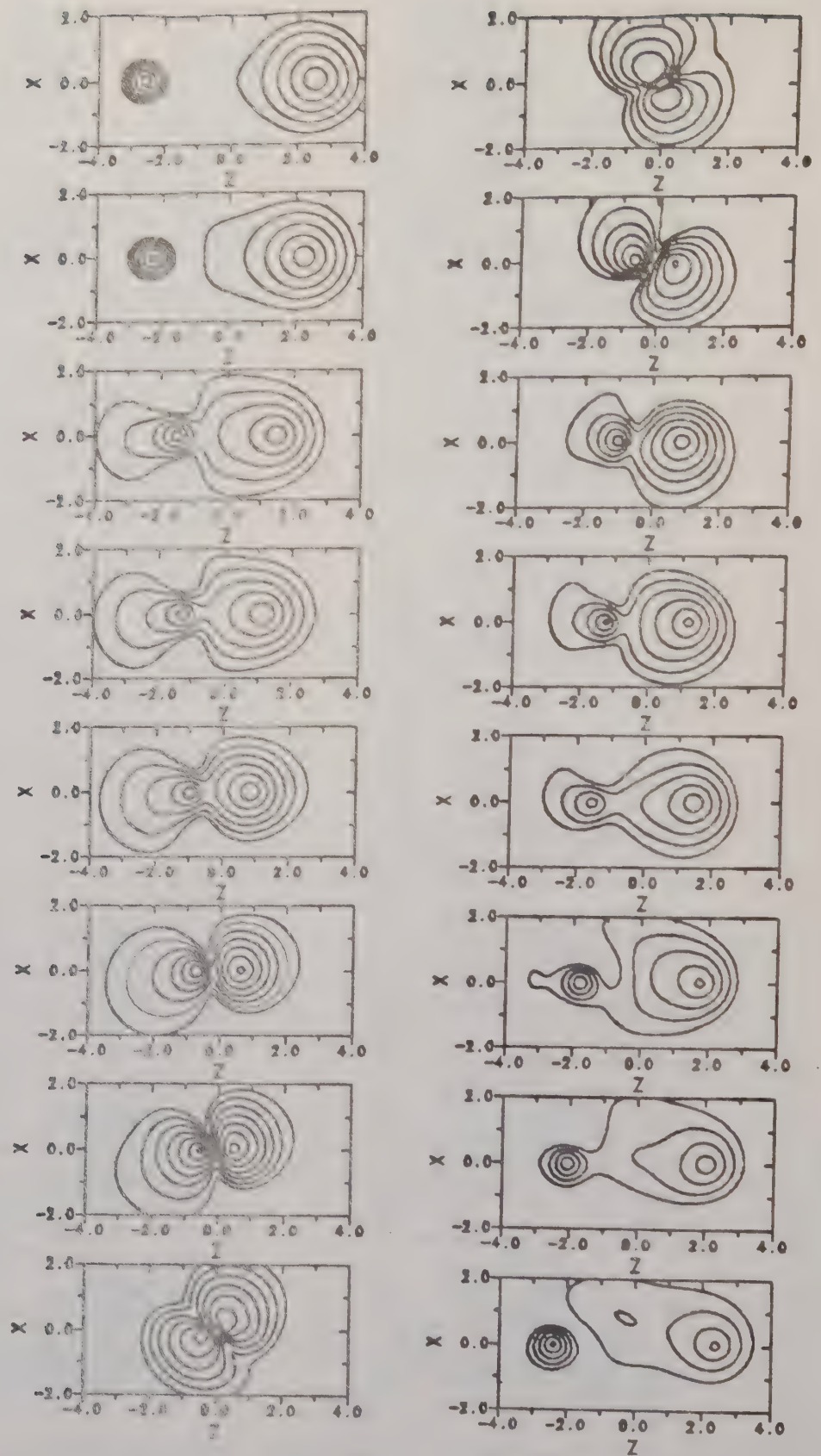


Bild 24: Elektronendichte für $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ Triplet

7 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden Ladungswechselreaktionen, im Rahmen der SCA, für Zweielektronensysteme innerhalb der TDHF-Methode untersucht. Der dabei betrachtete Energiebereich ging von 2 keV/Nukleon bis 50 keV/Nukleon. Die TDHF-Gleichungen wurden in einer Entwicklung nach Zweizentrenfunktionen gelöst. Dabei wurde die vollständige Elektron-Elektron Wechselwirkung in die Berechnung einbezogen. Obwohl die TDHF-Theorie nichtlinear ist, sind die Auswirkungen der Nichtlinearität in der Atomphysik so gering, daß es möglich ist Übergangswahrscheinlichkeiten anzugeben. Untersucht wurden Stöße von nackten Ionen auf ein Heliumtarget im Grundzustand. Hierbei ist die Elektron-Elektron Wechselwirkung, wegen der Spinartung, gerade durch $1/2$ mal dem direkten Term gegeben. Daneben wird in dieser Arbeit auch die explizite Einbeziehung des Austauschterms aufgezeigt, und der Einfluß des Austauschpotentials für verschiedene Spinzustände bei $\text{He}^+(2s) + \text{He}^+(2s)$ sowie $\text{He}^+(2s) + \text{H}(1s)$ Stößen untersucht. Es zeigte sich, daß bei großen Stoßparametern kaum Unterschiede in den Übergangswahrscheinlichkeiten zu beobachten waren, während bei kleinen Stoßparametern ein signifikanter Unterschied, vor allem in der Entwicklung der Elektronendichte beobachtet werden konnte. Beim Vergleich der berechneten Wirkungsquerschnitte mit den Ergebnissen anderer Rechnungen, sowie experimentell gewonnenen Daten, zeigte es sich, daß man mit dieser Methode in den richtigen Größenordnungen liegt. Eine genauere Analyse nach den jeweiligen Einfängen in bestimmte Ladungszustände zeigte jedoch, daß man in der TDHF-Näherung den Einfang in den Grundzustand überschätzt, dagegen aber kaum Einfang in höher angeregte Zustände beobachtet. Da vergleichbare Rechnungen das gleiche Ergebnis liefern [SAN83, SAN83a], kann man Fehler in der Rechnung ausschliessen. Die Ursache hierfür dürfte in der Vernachlässigung jeder Art von Korrelationseffekten sowie in der Näherung mit einer einzigen Slaterdeterminante liegen. Eine Verbesserung wäre mit einem Konfigura-

tionsmischungsansatz zu erreichen, d.h. die Vielteilchenwellenfunktion wird durch eine Überlagerung von mehreren Slaterdeterminanten beschrieben. Harel und Salin [HAR80] erhalten mit einem solchen Ansatz ganz ausgezeichnete Ergebnisse.

Die Verwendung der Hylleraasbasis schränkt die Anwendbarkeit dieser Methode ein auf schwach asymmetrische Stoßsysteme, da man mit dem Asymptotikparameter a nur die korrekte Asymptotik jeweils eines Stoßpartners beschreiben kann. Eine mögliche Erweiterung wäre die Verwendung von zwei Sätzen von Hylleraasfunktionen, jeweils mit dem optimalen Asymptotikparameter für das Target und das Projektil.

Eine sinnvolle Erweiterung wäre die Einbeziehung von Kontinuumsfunktionen, die eine Beschreibung von Ionisation ermöglichen würde.

Ein Nachteil der TDHF-Methode liegt in der enormen Rechenzeit, die für jeden Stoßparameter benötigt wird. Da die Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen etwa 50 - 60 % der gesamten Rechenzeit erfordert, ist eine Erweiterung auf Vielelektronensysteme unrealistisch. Für solche Fälle könnte man jedoch unter Umständen die am Stoßprozess unbeteiligten Elektronen, den sogenannten core, als Abschirmung des einen Stoßpartners betrachten, und ein effektives Zweiteilchenproblem lösen.

Anhang

Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkungsmatrixelemente

Wie bereits in Kapitel 3.4 erwähnt berechne ich die Matrixelemente der Elektron-Elektron Wechselwirkung in zwei Schritten:

1. Entwicklung des Elektron-Elektron Potentials nach Hylleraasfunktionen, die Entwicklungskoeffizienten werden durch Lösen der Poissongleichung bestimmt.

2. Berechnung der Matrixelemente in der Zweizentrenbasis.

In diesem Anhang soll im Detail die Berechnung der Elektron-Elektron Wechselwirkung in dieser Darstellung gezeigt werden. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkungsmatrix ist gegeben durch:

$$(V_{ee})_{\alpha\beta} = \langle \Phi_\alpha | -v_d + v_{ex} | \Phi_\beta \rangle \quad (A.1)$$

wobei im Folgenden Φ für Hylleraasfunktionen sehen soll. Zur Berechnung des Elektron-Elektron Potentials führe ich die Größe v^{kj} ein, mit

$$v_d = \sum_{k=1}^2 v^{kk}$$

und

$$v_{ex}^{kj} = v^{kj} \quad (A.2)$$

Für v^{kj} mache ich nun den Ansatz:

$$v^{kj} = \sum_{\gamma} f_{\gamma}^{kj}(t) \Phi_{\gamma} \quad (\text{A.3})$$

Die Koeffizienten $f_{\gamma}^{kj}(t)$ werden durch Lösen der Poissongleichung bestimmt:

$$\sum_{\gamma} f_{\gamma}^{kj}(t) \langle \Phi_{\alpha} | \Delta | \Phi_{\gamma} \rangle = -4\pi \sum_{\beta\delta} c_{\beta}^{k*}(t) c_{\delta}^j(t) \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\beta}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle \quad (\text{A.4})$$

Für die Matrixdarstellung der Elektron-Elektron Wechselwirkung für die beiden TDHF-Gleichungen erhält man damit:

$$\begin{aligned} (V_{ee}^1)_{\alpha\beta} &= \sum_{\gamma} [f_{\gamma}^{22}(t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} f_{\gamma}^{12}(t)] \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle \\ (V_{ee}^2)_{\alpha\beta} &= \sum_{\gamma} [f_{\gamma}^{11}(t) - \delta_{\sigma_1\sigma_2} f_{\gamma}^{21}(t)] \langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\gamma}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

In diesem Anhang will ich die analytische Berechnung der Integrale

$$\langle \Phi_{\alpha}(\underline{r}, R) \Phi_{\beta}(\underline{r}, R) \Phi_{\delta}(\underline{r}, R) \rangle$$

darstellen.

Mit dem Volumenelement $d\tau$ in elliptischen Koordinaten:

$$d\tau = (R/2)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\phi \quad (\text{A.6})$$

erhält man für das Integral:

$$I = (R/2)^{-3/2} \int \int \int (\xi^2 - \eta^2) e^{-3/2 \kappa (\xi^2 - 1)^{(m+m'+m'')/2}} L_n^m(\kappa) L_{n'}^{m'}(\kappa) L_{n''}^{m''}(\kappa) \\ P_l^m(\eta) P_{l'}^{m'}(\eta) P_{l''}^{m''}(\eta) \cos m\phi \cos m'\phi \cos m''\phi d\xi d\eta d\phi$$

(A.7)

Dieses Integral faktorisiert in ξ und η , man erhält die beiden Teile:

$$I = (R/2)^{-3/2} \left[\int d\xi e^{-3\kappa/2 (\xi^2 - 1)^{(m+m'+m''+2)/2}} L_n^m(\kappa) L_{n'}^{m'}(\kappa) L_{n''}^{m''}(\kappa) \right. \\ \left. \int d\eta d\phi P_l^m(\eta) P_{l'}^{m'}(\eta) P_{l''}^{m''}(\eta) \cos m\phi \cos m'\phi \cos m''\phi \right. \\ \left. + \int d\xi e^{-3\kappa/2 (\xi^2 - 1)^{(m+m'+m'')/2}} L_n^m(\kappa) L_{n'}^{m'}(\kappa) L_{n''}^{m''}(\kappa) \right. \\ \left. \int d\eta d\phi (1 - \eta^2) P_l^m(\eta) P_{l'}^{m'}(\eta) P_{l''}^{m''}(\eta) \cos m\phi \cos m'\phi \cos m''\phi \right]$$

(A.8)

Zur Berechnung der vier Integrale verwende ich folgende Notation:

$$I_{\eta 1} = \int d\eta d\phi P_l^m(\eta) P_{l'}^{m'}(\eta) P_{l''}^{m''}(\eta) \\ I_{\eta 2} = \int d\eta d\phi (1 - \eta^2) P_l^m(\eta) P_{l'}^{m'}(\eta) P_{l''}^{m''}(\eta) \\ I_{\xi 1} = \int d\xi e^{3\kappa/2 (\xi^2 - 1)^M} L_n^m(\kappa) L_{n'}^{m'}(\kappa) L_{n''}^{m''}(\kappa) \\ I_{\xi 2} = \int d\xi e^{3\kappa/2 (\xi^2 - 1)^{M+1}} L_n^m(\kappa) L_{n'}^{m'}(\kappa) L_{n''}^{m''}(\kappa)$$

(A.9)

mit $M = (m+m'+m'')/2$

I wird damit zu

$$I = (R/2)^{-3/2} [I_{\xi 2} I_{\eta 1} + I_{\xi 1} I_{\eta 2}] \quad (\text{A.10})$$

Die Berechnung der Integrale $I_{\eta 1}$ und $I_{\eta 2}$

Für die Berechnung der η -abhängigen Integrale benutze ich die Euleridentität und erhalte:

$$\begin{aligned} I_{\eta 1} &= 1/8 \int d\eta d\phi P_l^m(\eta) (e^{im\phi} + e^{-im\phi}) \\ &\quad P_{l'}^{m'}(\eta) (e^{im'\phi} + e^{-im'\phi}) P_{l''}^{m''}(\eta) (e^{im''\phi} + e^{-im''\phi}) \\ &= 1/8 \int d\eta d\phi [c(lm) Y_{lm}(\eta, \phi) + c(m, l) Y_{lm}^*(\eta, \phi)] \\ &\quad [c(m'l') Y_{l'm'}(\eta, \phi) + c(m', l') Y_{l'm'}^*(\eta, \phi)] \\ &\quad [c(m''l'') Y_{l''m''}(\eta, \phi) + c(m'', l'') Y_{l''m''}^*(\eta, \phi)] \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

wobei

$$Y_{lm}(\eta, \phi) = (-)^m [(2l+1)(l-m)!/4\pi(l+m)!]^{1/2} P_l^m(\eta) e^{im\phi}$$

die Kugelflächenfunktionen und die $c(lm)$ Normierungsfaktoren

$$c(ml) = (-)^m [4\pi(l+m)!/(2l+1)(l-m)!]^{1/2}$$

sind. In der weiteren Rechnung werde ich auf die Angabe der Argumente verzichten. Ausmultiplizieren liefert:

$$\begin{aligned} I_{\eta 1} = & c(ml)c(m'l')c(m''l'')/8 \int d\eta d\phi [Y_{lm} Y_{l'm'} Y_{l''m''} + Y_{lm} Y_{l'm'} Y_{l''m''}^* \\ & + Y_{lm} Y_{l'm'}^* Y_{l''m''} + Y_{lm} Y_{l'm'}^* Y_{l''m''}^* + Y_{lm}^* Y_{l'm'} Y_{l''m''} \\ & + Y_{lm}^* Y_{l'm'} Y_{l''m''}^* + Y_{lm}^* Y_{l'm'}^* Y_{l''m''} + Y_{lm}^* Y_{l'm'}^* Y_{l''m''}^*] \end{aligned} \quad (A.12)$$

Nach Edmonds [EDM64] gilt die Beziehung:

$$\begin{aligned} \int d\eta d\phi Y_{lm} Y_{l'm'} Y_{l''m''} \\ = [(2l+1)(2l'+1)(2l''+1)/4\pi]^{1/2} \{l,l',l'';0,0,0\} \{l,l',l'';m,m',m''\} \end{aligned} \quad (A.13)$$

wobei die $\{l,l',l'';m,m',m''\}$ die Wignerschen 3j-Symbole darstellen. Für das Integral $I_{\eta 1}$ ergibt sich mit dieser Schreibweise:

$$\begin{aligned} I_{\eta 1} = & c(ml)c(m'l')c(m'',l'')/8 [(2l+1)(2l'+1)(2l''+1)/4\pi]^{1/2} \\ & \{l,l',l'';0,0,0\} [\{l,l',l'';m,m',m''\} + (-)^{m''} \{l,l',l'';m,m',-m''\} \\ & + (-)^{m'} \{l,l',l'';m,-m',m''\} + (-)^{m'+m''} \{l,l',l'';m,-m',-m''\} \\ & + (-)^m \{l,l',l'';-m,m',m''\} + (-)^{m+m''} \{l,l',l'';-m,m',-m''\} \\ & + (-)^{m+m'} \{l,l',l'';-m,-m',m''\} + (-)^{m+m'+m''} \{l,l',l'';-m,-m',-m''\}] \end{aligned}$$

(A.14)

dabei wurde die Relation

$$Y_{lm}^* = (-)^m Y_{l-m}$$

(A.15)

benutzt. Verwendet man weiter die Beziehung:

$$\{l, l', l''; m, m', m''\} = (-)^{l+l'+l''} \{l, l', l''; -m, -m', -m''\}$$

(A.16)

und berücksichtigt, daß die 3j-Symbole Null sind für $l+l'+l''$ ungerade, so ergibt sich für $I_{\eta 1}$:

$$I_{\eta 1} = \pi [(l+m)! (l'+m')! (l''+m'')! / (l-m)! (l'-m')! (l''-m'')!] (-)^{m+m'+m''}$$

$$\{l, l', l''; 0, 0, 0\} [\delta_{m,0} \delta_{m',0} \delta_{m'',0} \{l, l', l''; 0, 0, 0\}$$

$$+ (-)^{m''} \delta_{m''-m', m} \{l, l', l''; m''-m', m', -m''\}$$

$$+ (-)^{m'} \delta_{m'-m'', m} \{l, l', l''; m'-m'', -m', m''\}$$

$$+ (-)^m \delta_{m'+m'', m} \{l, l', l''; m'+m'', -m', -m''\}]$$

(A.17)

Diese Form läßt sich einfach berechnen. Für die Bestimmung der 3j-Symbole verwende ich das Programm "ANGMOM" aus der Bibliothek der Computer Physics Communication (CPC) [SRI78]. Die Berechnung des Integrals $I_{\eta 2}$ läßt sich durch Anwendung von Rekursionsformeln für die Legendrepolynome auf die Berechnung von

$I_{\eta 1}$ zurückführen. Sind mindestens zwei m-Quantenzahlen $\neq 0$, so verwende ich die Rekursionsformel:

$$(l-m)(l-m+1)P_{l+1}^m = (l+m)(l+m+1)P_{l-1}^m + (2l+1)(1-\eta^2)P_l^{m+1} \quad (\text{A.18})$$

Sind zwei m-Quantenzahlen Null, so greift man auf folgende Rekursionsformel zurück:

$$\eta P_l = ((l+1)P_{l+1} + lP_{l-1})/(2l+1) \quad (\text{A.19})$$

für diesen Fall gilt:

$$I_{\eta 2} = I_{\eta 1} - \int d\eta \eta^2 P_l^m P_l^{m'} P_l^{m''} \quad (\text{A.20})$$

Die Berechnung der Integrale $I_{\xi 1}$ und $I_{\xi 2}$

Das Integral $I_{\xi 1}$ war gegeben durch:

$$I_{\xi 1} = \int_1^{\infty} d\xi \, e^{-3\kappa/2} (\xi^2 - 1)^{(m+m'+m'')/2} L_n^m L_n^{m'} L_n^{m''} \quad (\text{A.21})$$

Auch hier lasse ich, zur Vereinfachung, die Argumente der Laguerrepolynome weg. Verwendet man den Zusammenhang zwischen ξ und κ

$$\kappa = \frac{\xi - 1}{a}$$

so folgt für $I_{\xi 1}$:

$$\begin{aligned} I_{\xi 1} &= a \int_0^{\infty} d\kappa \, e^{-3\kappa/2} (a^2 \kappa^2 + 2a\kappa)^{(m+m'+m'')/2} L_n^m L_n^{m'} L_n^{m''} \\ &= a^{m+m'+m''+1} \int_0^{\infty} d\kappa \, e^{-3\kappa/2} (\kappa + 2/a)^{(m+m'+m'')/2} \\ &\quad \kappa^{(m+m'+m'')/2} L_n^m L_n^{m'} L_n^{m''} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Aus der Berechnung der η -Abhängigen Integrale folgt, daß $m+m'+m''$ immer eine gerade Zahl sein muß. Mit der Definition:

$$M := (m+m'+m'')/2 \quad (\text{A.23})$$

erhält man für $I_{\xi 1}$:

$$I_{\xi 1} = a^{2M+1} \sum_{\lambda=0}^M \binom{M}{\lambda} (2/a)^\lambda \int_0^\infty d\kappa e^{-3\kappa/2} \kappa^{2M-\lambda} L_n^m L_n^{m'} L_n^{m''} \quad (\text{A.24})$$

Schreibt man für ein Laguerrepolynom die Reihendarstellung:

$$L_n^m = \sum_{\mu=0}^n (-)^\mu \binom{n+m}{n-\mu} \kappa^{\mu/\mu!} \quad (\text{A.25})$$

so wird $I_{\xi 1}$ zu:

$$I_{\xi 1} = a^{2M+1} \sum_{\lambda=0}^M \binom{M}{\lambda} (2/a)^\lambda \sum_{\mu=0}^n (-)^\mu \binom{n+m}{n-\mu} 1/\mu! \int_0^\infty d\kappa e^{-3\kappa/2} \kappa^{2M+\mu-\lambda} L_n^{m'} L_n^{m''} \quad (\text{A.26})$$

Dieses Integral wurde bereits von Mayr [MAY35] in seiner Veröffentlichung über "Integraleigenschaften der Hermiteschen und Laguerreschen Polynome" in verallgemeinerter Form gelöst. Er gibt folgende Beziehung an:

$$J := \int_0^\infty d\kappa e^{-\lambda\kappa} L_r^a(\alpha\kappa) L_s^b(\beta\kappa) \kappa^{\sigma-1} = c \lambda^{-\sigma} F_2(\sigma, -r, -s, a+1, b+1, \alpha/\lambda, \beta/\lambda)$$

mit

$$c := \int_0^\infty d\kappa e^{-\lambda\kappa} L_r^a(0) L_s^b(0) \kappa^{\sigma-1}$$

$$= \binom{r+a}{r} \binom{s+b}{s} \Gamma(\sigma) / \lambda^\sigma \quad (\text{A.27})$$

Für den hier vorliegenden Fall ist die konfluente hypergeometrische Funktion F_2 :

$$\begin{aligned} F_2(\sigma, -r, -s, a+1, b+1, 2/3, 2/3) &= \sum_{m=0, n=0}^{\infty} [(\sigma)_{m+n} (-r)_m (-s)_n / ((a+1)_m (b+1)_m m! n!)] (2/3)^{m+n} \\ &= \sum_{m=0, n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\sigma+m+n) \Gamma(-r+m) \Gamma(-s+n) \Gamma(a+1) \Gamma(b+1)}{\Gamma(\sigma) \Gamma(-r) \Gamma(-s) \Gamma(a+m+1) \Gamma(b+1+n) n! m!} (2/3)^{m+n} \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Die Summationen brechen zusammen für $m > r$ und $n > s$:

$$\begin{aligned} &= \sum_{m=0}^r \sum_{n=0}^s \frac{(\sigma+m+n-1)! a! b! (-)^{m+n} r! s!}{(\sigma-1)! (a+m)! (b+n)! m! n! (r-m)! (s-n)!} (2/3)^{m+n} \\ &=: I(\sigma, r, s, a, b) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Damit wird $I_{\xi 1}$ zu:

$$I_{\xi 1} = a^{2M+1} \sum_{\lambda=0}^M \binom{M}{\lambda} (2/a)^\lambda \sum_{\mu=0}^n (-)^{\mu/\mu!} \binom{n+m}{n-\mu} I(2M+\mu-\lambda+1, n', n'', m', m'')$$

(A.30)

Für die Größe

$$\sum_{\mu=0}^n (-)^{\mu}/\mu! \binom{n+m}{n-\mu} I(2M+\mu-\lambda+1, n', n'', m', m'')$$

(A.31)

führe ich nun die Bezeichnung

$$J(2M-\lambda, n, n', n'', m, m', m'')$$

(A.32)

ein. $I(M+\sigma+1, n', n'', m', m'')$ gehorcht natürlich immer noch den Rekursionsformeln der Laguerrepolynome:

$$\begin{aligned} I(M+\sigma+1, n', n'', m', m'') &= (2n'+m'+1) I(M+\sigma, n', n'', m', m'') \\ &\quad - (n'+m') I(M+\sigma, n'-1, n'', m', m'') \\ &\quad - (n'+1) I(M+\sigma, n'+1, n'', m', m'') \end{aligned}$$

(A.33)

Das vereinfacht die Rechnung, denn man muß nicht für alle auftretenden Quantenzahlen die numerisch schwierig zu behandelnde F_2 -Funktion berechnen. Die Vorschrift lautet:

Berechne $I(1, n', n'', m', m'')$ mit Hilfe der F_2 -Funktion so genau wie möglich und bestimme alle Weiteren rekursiv.

Auszurechnen für alle n', n'', m', m'' ist also:

$$I(1, n', n'', m', m'') = (n' + m')! (n'' + m'')! / (3/2)$$

$$\sum_{\alpha=0}^{n'} \sum_{\beta=0}^{n''} \frac{(\alpha + \beta)! (-)^{\alpha + \beta}}{(m' + \alpha)! (m'' + \beta)! \alpha! \beta! (n' - \alpha)! (n'' - \beta)!} (2/3)^{\alpha + \beta}$$

Hat man alle $I(M, n', n'', m', m'')$ berechnet, so kann man, unter Verwendung der gleichen Rekursionsformel, auch die gesuchten Integrale $J(M+s, n, n', n'', m, m', m'')$ berechnen:

$$\begin{aligned} J(M+s, n, n', n'', m, m', m'') &= (2n' + m' + 1) J(M+s-1, n, n', n'', m, m', m'') \\ &\quad - (n' + m') J(M+s-1, n, n'-1, n'', m, m', m'') \\ &\quad - (n' + 1) J(M+s-1, n, n'+1, n'', m, m', m'') \end{aligned}$$

(A.34) Auch

für die ξ -Abhängigen Integrale gibt es einen einfachen Zusammenhang zwischen $I_{\xi 1}$ und $I_{\xi 2}$. Mit der Beziehung

$$(\xi^2 - 1)^{M+1} = (\xi^2 - 1)(\xi^2 - 1)^M = (\xi^2 - 1)^M ((\xi - 1)^2 + 2(\xi - 1))$$

(A.35)

läßt sich $I_{\xi 2}$ in folgender Weise schreiben:

$$I_{\xi 2} = EW_2 + 2EW_1$$

(A.36)

mit

$$EW_1 = a^{2M+2} \sum_{\lambda=0}^M \binom{M}{\lambda} (2/a)^\lambda \sum_{\mu=0}^n (-)^{\mu/\mu!} \binom{n+m}{n-\mu} I(2M+\mu-\lambda+2, n', n'', m', m'')$$

$$EW_2 = a^{2M+3} \sum_{\lambda=0}^M \binom{M}{\lambda} (2/a)^\lambda \sum_{\mu=0}^n (-)^{\mu/\mu!} \binom{n+m}{n-\mu} I(2M+\mu-\lambda+3, n', n'', m', m'')$$

(A.37)

Referenzen

- AFR78 V.V. Afrosimov, A.A. Bansaleau, G.A. Leiko und M.N. Panov
Sov. Phys. JETP 47,(1978),837
- BAR58 C.F. Barnett, H.K. Reynolds, Phys. Rev. 109,(1958),355
- BAT67 D.R. Bates, A.R. Holt, Proc. Roy. Soc. A292,(1967),168
- BER68 H. Berkner, R.V. Pyle, J. Warren Stearns und J.C. Warren
Phys. Rev. 166,(1968),44
- BRI76 J.S. Briggs, Rep. Prog. Phys. 39,(1976),217
- CLE74 E. Clementi und C. Roetti, Atom. Data and Nucl.
Data Tables 14,(1974),177
- DEL72 J.B. Delos, W.R. Thorson, S.K. Knudson,
Phys. Rev. A6,(1972),709
- DIR30 P.A.M. Dirac, Proc. Cambridge Phil. Soc. 26,(1930),376
- EDM64 Edmonds ,Der Drehimpuls in der Quantenmechanik
Bibliographisches Institut
(Mannheim, 1964)
- FRI82 W. Fritsch, C.D. Lin, J. Phys. B15,(1982),1255
- GRA84 K. Gramlich, N. Grün, W. Scheid, DPG Verhandlungen 2/1984
- GRI82 J.J. Griffin, in TDHF and beyond, Proc Bad Honnef Meeting,
Hrsg. K. Goeke und P.G. Reinhard
(Springer, Berlin 1982)

- HAR80 C. Harel und A. Salin, J. Phys. B13,(1980),785
- HEE66 F.J. de Heer, J. Schutten, H. Moustafa' Physica 32,(1966),1766
- HIP83 R. Hippler in Fundamental Processes in Energetic Atomic Collisions,
Hrsg.: H.O. Lutz, J.S. Briggs, H.Kleinpoppen,
NATO ASI Series B103,(1983)
- HYL31 E. Hylleraas, Z. f. Physik 71,(1931),739
- JAN81 R.K. Janev, L.P.Presnyakov, Phys. Rep. 70,(1981),1
- KER76 A. Kermann und S.E. Koonin, Ann. Phys. 100,(1976),332
- KUL82 K.C. Kulander, K.R. Sandhya Devi, S.E. Koonin
Phys. Rev. A25,(1982),2968
- LIC63 W. Lichten, Phys. Rev. 131,(1963),229
- LÜD81 H.J. Lüdde, Dissertation Frankfurt 1981
- LÜD83 H.J. Lüdde, R.M. Dreizler, J. Phys. B16,(1983),3973
- LÜD84 H.J. Lüdde, R.M. Dreizler, zur Veröff. eingereicht
- MAY35 K. Mayr, Math. Zeitschr. 39,(1935),597
- MCC68 R. Mc Carrol, A. Salin, J. Phys. B1,(1968),163
- PIV71 L.I. Pivovar, Yu. Z. Levchenko, G.A. Kribosonov,
Sov. Phys. JETP 32,(1971),11
- SAN83 K.R. Sandhya Devi, J.D. Garcia, J. Phys. B16,(1983),2837
- SAN83a K.R. Sandhya Devi, J.D. Garcia, private Mitteilung

- SHA75 L.F. Shampine und M.K. Gordon, Computer Solution of Ordinary
Differential Equations - The Initial Value Problem
(Freeman, San Francisco 1975)
- SRI78 K. Srinivasa-Rao, K. Venkatesh, Comp. Phys. Com. 15,(1978),237
- STI56 P.M. Stier, C.F. Barnett, Phys. Rev. 103,(1956),896
- SUZ84 H. Suzuki, J. Kajikawa, N. Toshima, H. Ryufuku, T. Watanabe
Phys. Rev. A29,(1984),525
- WIR81 I. Wirkner-Bott, W. Seim, A. Müller, P. Kester, E. Salzborn,
J. Phys. B14,(1981),3987

Bei Herrn Professor Dr. R.M. Dreizler bedanke ich mich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit und die Unterstützung während der Durchführung.

Mein besonderer Dank gilt Dr. H.J. Lüdde, der mir nicht nur zahlreiche Computer-Programme überließ, sondern durch seine ständige Bereitschaft zu Diskussionen und Hilfe die Grundlage für das Gelingen dieser Arbeit schuf.

Weiterhin bedanke ich mich bei allen Kollegen am Institut, die mir mit hilfreichen Ratschlägen bei der Bewältigung vieler Probleme geholfen haben.

Ein herzlicher Dank gilt der FAZIT-Stiftung der Frankfurter Allgemeinen Zeitung, die mich durch ein Stipendium vom Juli 1983 bis Juni 1984 finanziell unterstützte.

Die Rechnungen zu dieser Arbeit wurden an der Rechenanlage der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt durchgeführt.

Lebenslauf

Geburt: 21. 3. 1954 in Kempten/Allgäu

Schulen: von Ostern 1961 bis Ostern 1964 Grundschule in Eisenharz
Allgäu

von Ostern 1964 bis Ostern 1965 Grundschule in Frankfurt;

von Ostern 1965 bis Juni 1973 neusprachliches Gymnasium
in Frankfurt;

1973 Abitur, anschliessend vom Herbst 1973 bis Sommer 1975
Wehrdienst bei der Bundeswehr;

Studium: Beginn des Physikstudiums im Wintersemester 1975/76;
Vordiplom im Sommersemester 1977;
Diplom in Physik im Wintersemester 1980/81;
Beginn der Doktorarbeit im Sommersemester 1981.

Meine akademischen Lehrer waren die Professoren

Bass, Bethge, Dreizler, Elze, Gerritzen, Greiner, Gerhardt,
Hartmann, Keim, Kummer, Lüdde, Martienssen, Maruhn, Mauck, Miller,
Mohler, Müller, Reichert, Roeski, Schaarschmidt, Scheid, Schwarz,
Stelzer, Wächter

